

THESIS / THÈSE

DOCTEUR EN SCIENCES

Etude des propriétés des hamiltoniens unidimensionnels aléatoires : Application au cas dimère

Khalfoun, Hafid

Award date:
2010

Awarding institution:
Université de Namur

[Link to publication](#)

General rights

Copyright and moral rights for the publications made accessible in the public portal are retained by the authors and/or other copyright owners and it is a condition of accessing publications that users recognise and abide by the legal requirements associated with these rights.

- Users may download and print one copy of any publication from the public portal for the purpose of private study or research.
- You may not further distribute the material or use it for any profit-making activity or commercial gain
- You may freely distribute the URL identifying the publication in the public portal ?

Take down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.



Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix

Faculté des Sciences

Centre de recherche en Physique de la Matière et du Rayonnement

Etude des propriétés des hamiltoniens unidimensionnels aléatoires :
Application au cas dimère

Composition du Jury :

Prof. O. Deparis
Prof. J.C. Charlier
Prof. M. Lepère
Prof. M. Bouamoud (co-promoteur)
Prof. L. Henrard (promoteur)

Dissertation présentée par :

Hafid Khalfoun
en vue de l'obtention du grade de
Docteur en Sciences

2010

© Presses universitaires de Namur & Hafid Khalfoun
Rempart de la Vierge, 13
B- 5000 Namur (Belgique)

Toute reproduction d'un extrait quelconque de ce livre,
hors des limites restrictives prévues par la loi,
par quelconque procédé que ce soit, et notamment par photocopie ou scanner,
est strictement interdite pour tous pays.

Imprimé en Belgique
ISBN : 987 – 2 – 87037 – 677 – 5
Dépôt légal : D / 2010 / 1881 / 22

Abstract

By scaling the mesoscopic conductance with the system length, the theory of Anderson localisation has predicted insulator transmission regimes in one-dimensional electronic systems for any disorder. Viewed as the origin of destructive interferences, randomness contributes actively to localised states in finite region of space. However by pairing the defect cells, delocalised Bloch-like states and diffusive transport appear in disordered system when transparency conditions of the dimer unit cells occurs. This is the conventional random dimer model.

The re-examination of the pioneer ideas of S. He and J.D. Maynard in the acoustic analogy of mesoscopic systems permitted us to describe the transmission properties of mechanical waves in the classical system of homogenous string charged by masses. By suitably introducing springs, the transmission at the dimer resonance can be enhanced from diffusive to ballistic response. For such ballistic transmission mechanical filters is examined and optimised for disordered host alloys within the random dimer model.

In the same way, the propagation of electromagnetic waves in one-dimensional stratified systems has been examined. By dealing with particular structural parameters, principal standing resonances are added into the transmission spectrum of defect and host unit cells. Ballistic transmission canals can be obtained in binary disordered photonic films at the dimer resonances. Various interesting transmission regimes near the dimer resonances are described.

The electronic transport in disordered carbon nanotubes with chemical defects is also examined. By doping simultaneously with Boron (B) and Nitrogen (N), BN dimer defect cell can be considered when B and N atoms are first closest neighbours. The BN dimer suppresses the localisation signatures induced by the isolated B and N defect states while the transmission for the BN nanodomains depends strongly on both the orientation of the BN nanodomain inside the host structure and the number of B (N) atoms in the nanodomain. By increasing the number of the BN dimers, the transmission in a BN nanodomain is governed by the tunnelling effect. Interesting resonant tunnelling transmissions can be obtained when two BN nanodefects spreading on the whole contour of the nanotube are separated inside the host nanotube according to the concept of the dimer unit cell.

In our study, the propagation of waves in analogue one-dimensional random systems has been studied within the random dimer model. In addition to the universal diffusive behaviour of the conductance at the conventional dimer resonance, interesting situations improving the transmission properties at the dimer resonance have been found: With a suitable choice of the defect and host unit cells, ballistic transmission canals can be opened providing an additional way to considerably enhance the transmission properties in such particular disordered systems.

Résumé

Le désordre source d'interférences destructives contribue activement au phénomène de la localisation d'Anderson. L'avènement du modèle unidimensionnel du dimère aléatoire comme exception à la règle établie par la théorie d'échelle de la localisation, a donné encore plus d'importance à ce domaine de recherche: En imposant à un défaut d'apparaître aléatoirement par paires, le motif dimère (de par sa transparence totale à des énergies particulières) est à l'origine de l'apparition d'états étendus similaires (mais pas identiques) aux états de Bloch. A ces résonances dimère, le mode de transmission est conventionnellement diffusif.

La reprise des idées fondatrices de S. He et J.D. Maynard sur l'analogie acoustique des systèmes mésoscopiques, nous a permis d'examiner les propriétés de transmission d'ondes mécaniques dans un système classique de corde vibrante chargée en masses. L'introduction du ressort sur chaque cellule fournit un moyen pratique pour l'ajustement des paramètres structuraux du milieu de propagation et améliore le régime de transmission à la résonance dimère : Avec l'alignement de la fréquence caractéristique du motif défaut dimère et de la fréquence libre du motif hôte, la transmission balistique est obtenue. Une étude sur les propriétés de transmission optimisées dans les filtres mécaniques balistiques est présentée. La même approche est étendue aux alliages hôtes désordonnés.

De même, en analogie avec le comportement des électrons dans les heterostructures désordonnées, la propagation des ondes électromagnétiques dans les systèmes stratifiés unidimensionnels a été examinée. La prise en considération de paramètres structuraux particuliers assurant l'apparition supplémentaire des résonances stationnaires principales hôte et défaut dans le spectre de transmission, permet d'améliorer les propriétés de transmission de ces structures : Avec l'application de la procédure d'alignement des fréquences caractéristiques des motifs défaut et hôte sur un canal de transmission commun, des transmissions balistiques sont enregistrées à la résonance dimère. Des régimes de transmission distincts proches de la résonance dimère optimisée sont mis en évidence.

La propagation des ondes électroniques dans les nanotubes de carbone à désordre structural a été également étudiée. Le dopage simultané en Bore (B) et Azote (N) par le défaut dimère BN a montré une suppression des effets de la localisation d'Anderson induits par les états défauts B et N respectivement. Par ailleurs, la transmission à travers des monodomains défaut BN dépend fortement de l'orientation de l'amas BN dans la structure hôte et du nombre d'atomes B (N) qui le composent : la diminution quasi exponentielle de la conductance en fonction du nombre croissant de dimères BN est synonyme d'un effet tunnel. Finalement, dans le cas défauts s'étendant sur tout le contour de nanotube BN, des pics de transmission - synonymes de la présence de l'effet tunnel résonant - peuvent apparaître dans le spectre de transmission, lorsque le motif dimère conventionnel est considéré.

Notre étude a eu pour vocation globale de décrire l'effet de la corrélation du désordre à courte portée sur la propagation d'ondes dans des systèmes unidimensionnels désordonnés. En plus du caractère diffusif universel de la résonance dimère conventionnelle, nous nous sommes aussi intéressés aux situations pouvant améliorer les propriétés de transmission à la résonance dimère : Avec le choix convenable des motifs hôte et défaut, le régime de transmission balistique peut être obtenu ouvrant ainsi un canal de transmission de premier choix et une voie supplémentaire dans les propriétés de transmission à la résonance dans les systèmes aléatoires à désordre corrélé.

Dédicaces

*A
mon défunt Père
et à
mon honorable Maman*

*A
Ma chère Epouse
et
à mes deux adorables filles : Ghada et Racha*

*A
Toute ma famille, à Oran*

Remerciements

*Tout est bien, qui finit bien.
Dieu merci !!!*

Mes remerciements les plus sincères vont au Dr. Luc Henrard, pour avoir accepté de m'accueillir au sein du Laboratoire de Physique du Solide aux Facultés Universitaires de Notre Dame de la Paix à Namur et avoir éclairé continuellement (avec tous les membres du L.P.S.) les longues journées de travail en Belgique (souvent mal ensoleillées ☹) par sa convivialité personnelle et ses compétences scientifiques.

Mon immense gratitude va aussi au Prof. Mammar Bouamoud (Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen (Algérie)), pour son soutien indéfectible et sa présence attentionnée durant tous les moments difficiles qui ont marqué cette longue période d'apprentissage de la physique et de la vie...

Mes remerciements vont aussi à

- Prof. Olivier Deparis
Professeur au département de Physique aux FUNDP pour m'avoir honoré de par sa présence en présidant le jury de soutenance de mon Doctorat en Sciences.
- Prof. Muriel Lepère
Professeur au département de Physique aux FUNDP pour avoir accepté d'examiner et scruter de si près le contenu de ma thèse de Doctorat en Sciences.
- Prof. Jean Christophe Charlier,
Professeur au département de Physique à l'Université Catholique de Louvain La Neuve pour son immense disponibilité et son captivant état d'esprit scientifique.

Sans oublier ☺

Les membre de ma famille à Oran [(ma maman, mes frères, mes belles sœurs, mes nièces (Imene, Ouarda, Hiba Hanane) et le petit Redouane Mebrouk] qui m'ont toujours marqué leur soutien

(Une brève pensée à Aami en Kabylie)

*Ma petite et précieuse famille à Chlef :
Nabila, Ghadida et Rachicha,*

La famille Balabdi,

Mes amis:

Brahim Ouali, Rafik Nedjah, Zoheir Harrache, AEK Kermoud, Hafid Bayo et Samir Bentata,

La communauté des Algériens :

*Ammar Khaled, Abdelkader Nouri, Mustapha, S. Goumri-Said, M.B. Kanoun
et autres Africains :Ernest, Kandy, Iddi et Gatété
de Namur.*

Mes salutations vont aussi à :

Tous mes collègues du Laboratoire de Physique du Solide, (sans oublier Hakim Amara)

Mme Isabelle Schievekamp, Mme Isabelle Derycke pour leur soutien logistique !!!

Pensées particulières à Messieurs :

Cedric Vandembem, Sylvain Latil, Patrick Hermet et Frédéric Wautelet

&

Tout mon profond respect au

Prof. Jean-Pol Vigneron,

Directeur du Laboratoire de Physique du Solide aux FUNDP.

Un Grand MERCI au Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique (Algérien) et à la Coopération Technique Belge (CTB) pour le financement de ma bourse de formation Doctorale entre l'Algérie et la Belgique.

Tannemirth à Mme Lynda Khelifi (CTB Alger),

et mes remerciements les plus chaleureux à tous les intervenants CTB-Bruxelles, pour leur encadrement administratif compétent !!!

Liste des publications

1. *H. Khalfoun, S. Bentata and M. Bouamoud, J. Appl. Sciences* **7**, 1131 (2007)
2. *H. Khalfoun, M. Bouamoud, S. Bentata and L. Henrard, Phys. Lett. A* **372**, 5501 (2008)
3. *H. Khalfoun, M. Bouamoud, S. Bentata, L. Henrard and C. Vandembem, J. of Optics A: Pure and Applied Optics* **11**, 125102 (2009)
4. *H. Khalfoun, S. Bentata, M. Bouamoud, L. Henrard and C. Vandembem, Superlattices and Microstructures* **46**, 803, (2009)
5. *H. Khalfoun, P. Hermet, L. Henrard and S. Latil, submitted to Phys. Rev. Letters.*

Table des Matières

<i>Introduction générale</i>	1
---	---

Chapitre 1

Généralités sur les systèmes unidimensionnels aléatoires

I.	Introduction	13
II.	Le phénomène de localisation dans les systèmes désordonnés.....	14
	1. La localisation d'Anderson	14
	2. La théorie d'échelle de la localisation d'Anderson	19
III	La suppression de la localisation dans les systèmes unidimensionnels : effet dimère	22
	1. Le modèle des liaisons fortes.....	22
	2. Le modèle de Kronig-Penney : Description numérique des propriétés de transmission d'une distribution binaire dotée de la fonction delta de Dirac.	25
IV	Conclusion	35
V.	Bibliographie	36

Chapitre 2

Propagation des ondes mécaniques dans les chaînes aléatoires à désordre binaire corrélés

I	Introduction	44
II	Etude de la propagation des ondes mécaniques dans les systèmes 1d	51
II.1	Le système de la corde vibrante chargée en masses.....	51
	A. Description de l'ordre parfait.....	51
	B. Etude du désordre compositionnel de masse.....	57
	1. Cas des composants binaires non corrélés	57
	a-Description des coefficients de transmission et de Lyapunov réduit	57
	b-Description de la nature des modes de transmission.....	60
	c-Conclusion.....	61
	2. Cas des composés binaires corrélés à courte portée : effet dimère.....	62
	a-Description des coefficients de transmission et de Lyapunov réduit	62
	b-Description de la nature des modes de transmission.....	66
	c- Conclusion.....	68
II.2	Le système de la corde vibrante chargée en résonateurs masses-ressorts.....	69
	A-Description d'un ordre parfait.....	70
	B-Etude des systèmes binaires désordonnés.....	73
	1. Nature des modes de transmission résonants	78
	2. La transmission balistique dans le modèle du dimère aléatoire	79
	a-La résonance de la commutation balistique.....	80
	b-La résonance dimère balistique.....	85
	c-Conclusion.....	88
	d-Application : Etude des filtres optiques balistiques.....	89
	1. La configuration dimère I.....	93
	2. La configuration dimère II.....	96
	3. La configuration dimère balistique dans un alliage hôte désordonné	97
	4. Conclusion.....	102
III.	Conclusion générale.....	103
	Tableaux récapitulatifs	105
IV.	Bibliographie	106

Chapitre 3

Propagation des ondes électromagnétiques dans les systèmes unidimensionnels stratifiés à désordre binaire aléatoires

I.	Introduction aux cristaux photoniques et à l'analogie électronique	115
II.	Etude des propriétés de transmission en incidence normale des ondes électromagnétiques dans les films phononiques unidimensionnels aléatoires à désordre binaire corrélé.....	120
	1. Introduction.....	120
	2. Etude des systèmes ordonnés en incidence normale	121
	3. Etude des systèmes binaires désordonnés	128
	a- Le désordre binaire conventionnel	128
	b- Le désordre binaire généralisé	133
	4. Optimisation des résonances de la configuration dimère généralisée	140
	a- Alignement sur la résonance défaut dimère	140
	b- Alignement sur la résonance principale hôte	144
	5. Conclusion	154
III.	Bibliographie	156

Chapitre 4

Propagation des ondes électroniques dans les nanotubes de carbone dopés

I.	Introduction sur les nanotubes de carbone parfaits	165
	1. Propriétés structurales des nanotubes de carbone monofeuillets	167
	2. Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monofeuillets	170
	2.1. Du graphène aux nanotubes de carbone	170
	a- Description de la structure de bandes du graphène par la méthode des liaisons fortes	170
	b- La méthode de repliement de zone	173
	c-Aperçu sur la DFT et la base d'orbitales atomiques numériques ...	175
	2. 2. Propriétés de transport des nanotubes de carbone parfaits	177
	a-Approche de Buttiker-Landauer	177
	b- Formalisme mathématique pour la transmission électronique dans les nanotubes de carbone : Méthode de la fonction de Green	179
	2.3 Description des propriétés de transport dans les nanotubes parfaits : Cas des nanotubes (10,10) métallique et (17,0) semi-conducteur	182

II. Etude des propriétés de transport dans les nanotubes de carbone à dopages de substitution	185
1. Problème de diffusion à une impureté dans les nanotubes de carbone : Cas du dopage en substitution à l'Azote (N) (au Bore (B))	187
2. Propriétés de transport des nanotubes de carbone co-dopés à l'Azote (N) et au Bore (B).....	191
a- Le problème de diffusion à une paire BN dans le nanotube de carbone...	192
b- Le problème de diffusion à un monodomaine BN dans le nanotube de carbone	194
c- Le phénomène de résonance par effet dimère conventionnel	198
III. Conclusion & perspectives	201
IV. Bibliographie	202

Conclusion générale	205
----------------------------------	-----

Annexes

Annexe I

Modèle électronique de Kronig-Penney pour une distribution de Dirac	215
Formule de Poincaré	217

Annexe II

Matrice de transfert pour les systèmes stratifiés unidimensionnels	219
1- Equations de Maxwell pour un milieu homogène.....	219
2- Comment une onde se propage-t-elle entre deux couches homogènes successives ?	223
3- Propriétés des systèmes périodiques : les cristaux photoniques	227
a- Ondes de Bloch.....	227
b- Matrice de translation.....	230
c- Modèle optique de Kronig-Penney.....	233
4- Les films photoniques.....	236
a- Matrice de transfert	237
b-Coefficients de transmission et coefficient de Lyapunov réduit	239

Annexe III

La transmission électronique à travers des nanotubes infinis	242
La méthode du potentiel effectif	244

Introduction générale

Les matériaux cristallins ont été largement étudiés depuis la naissance de la mécanique quantique. Le système parfaitement ordonné permet de classer les fonctions d'onde correspondantes en ondes de Bloch. Traduisant la périodicité du potentiel cristallin, ces états permis sont uniformément étendus le long de toute la structure [1].

En réalité, l'état cristallin est plutôt une exception qu'une règle. Dans la nature, le désordre existe à différents degrés : de la présence aléatoire de quelques impuretés dans un réseau hôte, à la génération intentionnelle de défauts dans les alliages et autres structures amorphes [2]. La présence d'un désordre dans le milieu de propagation, brise la symétrie de translation du système ordonné et peut provoquer en conséquence le confinement spatial de certains états de Bloch dans une région finie de l'espace. Le nombre d'états localisés dans le milieu désordonné est autant grand que le taux du désordre est grand. Pour un désordre suffisamment important, tous les états de Bloch disparaissent donnant lieu à des états localisés dans des régions finies de l'espace. Initialement conducteur à l'ordre parfait, le matériau perd ses propriétés de conduction métalliques à partir d'un seuil critique de désordre et devient isolant. C'est la localisation d'Anderson [3].

Le concept de la conductance dans les systèmes mésoscopiques a été introduit par D.J. Thouless [4]. Son approche basée sur l'aptitude de l'onde électronique à diffuser le long d'une structure désordonnée, a constitué les genèses de la théorie d'échelle de la localisation qui a rigoureusement démontré le caractère localisé de tous les états permis dans les systèmes unidimensionnels aléatoires suffisamment désordonnés [5]. L'exception à cette règle est venue quelques années plus tard lorsqu'un phénomène de délocalisation dû à une corrélation du désordre à courte échelle est apparu dans des chaînes linéaires de Polyaniline. Initialement proposé par P. Phillips, le modèle du dimère aléatoire qui consiste à disposer l'élément défaut par paires aléatoires (sans effets d'agrégats) dans une structure hôte a permis d'expliquer l'origine de la suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels désordonnés [6]. L'apparition de résonances de transparence totale dans le spectre de transmission dans ces systèmes a suscité un immense intérêt. Ainsi avec l'apparition à des énergies particulières d'états étendus semblables aux états de Bloch (qui sont synonymes d'interférences constructives dans un ordre parfait), des propriétés de transmission métallique sont restaurées dans ces matériaux particulièrement désordonnés [7].

Cette transition de phase entre états localisés et états délocalisés fera l'objet de cette thèse. Par analogie aux modèles électroniques de Kronig-Penney unidimensionnels (en distribution de Dirac ou à profils rectangulaires), nous nous intéresserons de plus près au phénomène de la suppression de la localisation d'Anderson par corrélation du désordre à courte portée. Le processus de délocalisation par effet dimère est étendu à d'autres systèmes unidimensionnels équivalents [8,9]: la corde vibrante chargée en masse (et masse-ressort), les films photoniques et les nanotubes de carbone.

Le chapitre 1 est une introduction aux généralités sur les systèmes électroniques unidimensionnels désordonnés. Un aperçu sur l'évolution des connaissances de base et de la théorie d'échelle de la localisation est évoqué. Dans le but de décrire le phénomène de délocalisation dans les systèmes unidimensionnels désordonnés par corrélation de désordre, l'effet dimère est introduit dans son contexte conventionnel de transmission diffusive. Présenté dans le cadre du modèle électronique de Kronig-Penney et doté d'un potentiel sous forme de distribution de Dirac, les effets de la corrélation de désordre à courte portée sont examinés dans un système binaire aléatoire [10].

Par analogie, le chapitre 2 est consacré à l'étude de la propagation des ondes mécaniques dans les systèmes unidimensionnels désordonnés. Les propriétés de transmission sont décrites dans le système classique d'une corde vibrante homogène, tendue sur laquelle est disposé à des positions régulières un désordre structural de masses. Ce système qui répond aux conceptions fondatrices de l'analogie acoustique des problèmes de la physique de la matière condensée, telles que conçues par J. Maynard [11], est approprié pour évoquer l'équivalence mécanique – électronique dans le modèle de Kronig-Penney à distribution de Dirac [10].

Par ailleurs, en disposant d'un degré de liberté supplémentaire, notre étude permettra de revisiter l'effet dimère conventionnel [12] : Par l'insertion appropriée d'un ressort au niveau de chaque élément diffuseur (masse hôte et / ou défaut), nous tenterons de décrire les améliorations susceptibles d'apparaître sur les réponses de la transmission dans la corde vibrante, lorsque celle-ci est soumise à des manipulations intentionnelles du désordre de masse et / ou de ressort. Une optimisation des performances de transmission des filtres mécaniques basée sur l'effet dimère conventionnel est ainsi présentée. Dans le même contexte, cette approche est appliquée au cas des alliages hôtes désordonnés [13].

Aussi, motivés par le phénomène de délocalisation par effet dimère dans les heterostructures électroniques [14], le chapitre 3 portera par analogie sur l'étude de la propagation des ondes électromagnétiques dans les structures stratifiées unidimensionnelles désordonnées. Se présentant en alternance régulière de couches diélectriques différentes, les cristaux photoniques sont appropriés pour reproduire la physique fondamentale du modèle électronique de Kronig-Penney à profil de potentiel rectangulaire [15,16].

Conformément à la démarche précédente, le désordre est considéré pour des systèmes binaires de films photoniques [16]. Le désordre binaire est examiné dans son aspect conventionnel afin de démontrer en premier lieu la suppression de la localisation unidimensionnelle des photons par effet dimère [17]. Partant de motifs hôte et défaut à paramètres structuraux particuliers (vérifiant la condition de Bragg), le modèle du dimère aléatoire conventionnel est ensuite généralisé : un type supplémentaire de résonance dans les systèmes binaires est ainsi identifié dans le spectre de la transmission optique.

Devant une telle diversité dans la nature des modes de transmission parfaite, l'originalité de cette partie consiste à l'application de la procédure d'alignement des différentes résonances sur un canal de transmission commun (conforme à celle établie dans les systèmes mécaniques). Par ajustement convenable des paramètres structuraux des motifs hôte et défaut, la nature des nouveaux modes résonants est décrite pour chaque configuration dimère optimisée. Afin de démontrer les effets d'une telle procédure sur la qualité de la résonance dimère conventionnelle, les régimes de transmission autour de ces résonances sont examinés [17] : Des améliorations conséquentes sur les réponses de la transmission à la résonance dimère sont enregistrées. La nature conventionnelle des modes résonants dimère est modifiée et des régimes de transmission balistique plus favorable à la propagation de l'onde y apparaissent.

Le chapitre 4 examinera les propriétés de transport dans les nanotubes de carbone. Conçues à partir de l'enroulement de feuilles de graphène, ces structures quasi-unidimensionnelles peuvent être aussi bien métalliques que semi-conductrices [9,19]. Dopés à l'Azote (ou au Bore), ces structures répondent à ce désordre structural par la perte de canaux de transmission balistiques aux énergies caractéristiques des états défauts introduits par le dopant dans la structure de bandes du réseau hôte [20].

Dans le même contexte de corrélation de désordre à courte portée, nous examinons les propriétés de transport de structures tubulaires à co-dopage B et N : La réponse de transmission est décrite en fonction de la distance séparatrice B-N. La considération de ce dopage simultané en B et N, nous permet d'étudier le dimère B-N et les monodomains d'amas BN dont les propriétés de transport sont données en fonction de l'évolution spatiale du défaut monodomaine BN dans le réseau hôte.

Une autre manipulation du désordre consiste à considérer le motif défaut nano-domaine conforme au motif dimère conventionnel : Des pics de transmission intéressants apparaissent dans le profile de transmission lorsque deux monodomains BN sont spatialement séparés dans la structure hôte.

Comme perspective à cette partie, l'étude des propriétés de transport dans les nanotubes dopés aléatoirement par des motifs BN reste envisageable dans un proche avenir. Ceci reste tributaire des paramètres effectifs décrivant le potentiel généré par les atomes défauts [21].

En résumé , notre étude globale sur les propriétés de transmission des hamiltoniens unidimensionnels aléatoires a pour objectif principal la description des effets de la corrélation du désordre à courte portée par l'examen de procédés de manipulation du potentiel désordonné pouvant considérablement améliorer la qualité de la transmission à la résonance dimère conventionnelle. Dans ces systèmes particulièrement désordonnés, la transition de phase (état localisé - état étendu) est ainsi réexaminée dans un contexte de conditions de propagation plus favorables et des régimes de transmission à la résonance encore plus attrayants. L'ensemble des résultats obtenus sur les propriétés de transmission de ces hamiltoniens (mécaniques, optiques et électroniques) unidimensionnels aléatoires à désordre corrélé est présenté dans la conclusion générale.

References

1. F. Bloch, Z. phys. **52**, 555(1928)
2. I. M. Lifchitz, S.A. Gradeskul, L.A. Pastur, *Introduction to the theory of disordered systems*, Wiley interscience publication, (1988)
3. P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
4. D.C. Licciardello and D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **35**, 1475 (1975); D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **39**, 1167, (1977)
5. E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979), P.W. Anderson, D.J. Thouless, E. Abrahams and D.S. Fisher, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980); P.W. Anderson, Phys. Rev. B **23**, 4828 (1981), P.A. Lee and T.V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985); B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993), J.B. Pendry, Adv. Phys. **43**, 461 (1994),
6. H. Dunlap, H. L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990), P. Phillips, H.L. Wu, Sciences **252**, 1805(1992), H. L. Wu, W. Goff and P. Phillips, Phys. Rev. B **45**, 1623 (1992)
7. X.Q. Huang, S.S. Jiang, R.W. Peng, Y.M.Liu, A. Hu, Mod. Phys. Lett. B **17**, 1461 (2003).
8. P. Sheng, *Scattering and localization of classical waves in random media*, World Scientific, Singapore, (1990)
9. R. Saito, G. Dresselhaus and M.S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*, Imperial college press, London, England (1998)
10. E. Sanchez, F. Dominguez-Adame, Phys. Rev. B **74**, 147(1994),
11. S. He, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett **57**, 3171 (1986), S. He, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett. **62**, 1888 (1989); J.D. Maynard, Physica B **197**, 231 (1994); J.D. Maynard, Rev. Mod. Phys. **73**, 401(2001)
12. F. Bouhafs and N. Zekri, Mod. Phys. Lett. B **15**, 343 (2001).
13. H. Khalfoun, M. Bouamoud, S. Bentata, J. Appl. Sciences **7**, 1131 (2007); H. Khalfoun, S. Bentata, M. Bouamoud, L. Henrard, Phys. Lett. A **372**, 5501 (2008).
14. F. Dominguez-Adame, A. Sanchez and E. Diez , J. Appl. Phys. **81**, 777 (1997), S. Bentata, B. Ait Saadi and H. Sediki, Superlatt. Microstruct. **30**, 297 (2001); I. Gomez, F. Dominguez-Adame, E. Diez, Physica. B **324**, 235 (2002), S. Bentata, Superlatt. Microstruct. **37**, 292 (2005); S. Bentata, *Etudes des phénomènes de transport dans les*

- systèmes à une dimension*. Thèse de Doctorat. Université des Sciences et de la Technologie d'Oran, Algérie (2002).
15. J.D. Joannopoulos, R.D. Maede and J.N. Winn, *Photonic crystals, molding the flow of light*. Princeton University, Princeton, New Jersey, (1995) ; S. J. Johnson and J.D. Joannopoulos, *Photonic crystals, the road from theory to practice*, Kluwer Academic Publisher, Norwell, Massachussets, (2002) ; K. Sakoda, *Optical properties of photonic crystals*, Springer Verlag, Berlin, (2001) ; P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media* Wiley, Hoboken N.J., (2005).
 16. V. Lousse, *Etude Théorique de l'introduction de réflecteurs à cristaux photoniques dans les dispositifs optroniques planaires*. Mémoire de DEA, Université de Namur (FUNDP), Belgique (2002) ; V. Lousse. *Etude théorique des phénomènes de bistabilité dans les structures optiques non linéaires intégrant des cristaux photoniques*. Thèse de Doctorat, Université de Namur (FUNDP), Belgique (2003); C. Vandenbem. *Contribution à l'étude de la reflectance et du confinement des modes dans les systèmes optiques stratifiés*. Thèse de Doctorat, Université de Namur (FUNDP), Belgique (2006).
 17. Z. Zhao, F. Gao, R.W. Peng, L.S. Cao, D. Li, Z. Wang, M. Wang, C. Ferrari, Phys. Rev. B. 75, 165117 (2007), E.M. Nascimento, F.A.B.F. De Moura et M. Lyra, Phys. Rev. B **76**, 115120 (2007)
 18. H. Khalfoun, M. Bouamoud, S. Bentata, L. Henrard and C. Vandenbem, Journal of Optics A: Pure and Applied Optics **11**, 125102 (2009), H. Khalfoun, S. Bentata, M. Bouamoud, L. Henrard and C. Vandenbem, Superlattices and Microstructures **46**, 803 (2009)
 19. S. Ijima, Nature **354**, 56 (1991).
 20. H.J. Choi, J. Ihm, S.G. Louie and M.L. Cohen, Phys. Rev. Lett. **84**, 2917(2000).
 21. C. Adessi, S. Roche and X. Blase, Phys. Rev. B **73**, 125414 (2006).

Chapitre 1

Généralités sur les systèmes unidimensionnels aléatoires

Chapitre 1

Généralités sur les systèmes unidimensionnels aléatoires

I.	Introduction	13
II.	Le phénomène de localisation dans les systèmes désordonnés.....	14
	1. La localisation d'Anderson	14
	2. La théorie d'échelle de la localisation d'Anderson	19
III	La suppression de la localisation dans les systèmes unidimensionnels : effet dimère	22
	1. Le modèle des liaisons fortes.....	22
	2. Le modèle de Kronig-Penney : Description numérique des propriétés de transmission d'une distribution binaire dotée de la fonction delta de Dirac.	25
IV	Conclusion	35
V.	Bibliographie	36

I. Introduction

Peu après la découverte de la mécanique quantique, les physiciens ont commencé à l'appliquer aux électrons dans les solides. Ils se sont intéressés en premier lieu aux cristaux comportant peu de défauts structuraux dans lesquels, les électrons sont soumis en première approximation à un potentiel ayant la même périodicité de translation que le cristal. Grâce au théorème de Bloch [1], les états électroniques sont classés selon une structure de bandes, ce qui a permis d'expliquer le caractère isolant ou métallique de nombreux cristaux en fonction de l'appartenance ou pas du niveau de Fermi à la bande interdite [2]. Aussi à travers la théorie de Boltzmann, une approche semi-classique a été adoptée au transport électronique pour lequel les porteurs de charges sont analogues à des particules classiques subissant des collisions avec les défauts structuraux du cristal. Le transport dépendant des trois longueurs caractéristiques : la taille du système L , le libre parcours moyen l_e et la longueur d'onde de Fermi λ_F définit trois régimes de transmission : isolant lorsque $l_e < \lambda_F < L$, diffusif si $\lambda_F < l_e < L$ et balistique quand la condition $\lambda_F < L < l_e$ est vérifiée[3].

L'absence de la périodicité est due à la présence de défauts dans la structure. Lorsqu'il y a peu de défauts dans le cristal, les paquets d'ondes électroniques peuvent être considérés entre deux collisions consécutives comme des particules classiques. Mais, ce n'est plus le cas lorsque la densité de défauts augmente : la nature ondulatoire de l'électron se manifeste sur des distances de propagation supérieures à la distance moyenne (l_e) entre défauts. Ces effets d'interférences quantiques perturbent la propagation du paquet d'ondes et peuvent même arrêter totalement la propagation de l'onde électronique si le désordre est suffisamment important. La probabilité d'avoir un confinement d'électrons (dû au désordre) sur une distance caractéristique appelée longueur de localisation (notée ξ), a été démontrée par Anderson en 1958 [4]. Depuis, la théorie du transport dans les systèmes électroniques désordonnés s'est développée sur la base de la théorie d'échelle de la localisation pour décrire la physique fondamentale de la propagation des ondes dans les structures aléatoires mésoscopiques [5,6].

Ce chapitre reprend les approches de base établies dans le modèle d'Anderson, relatif au phénomène de la localisation dans les systèmes désordonnés. Nous discuterons l'évolution des notions fondamentales vers la théorie d'échelle de la localisation et plus particulièrement vers le phénomène de la localisation dans les systèmes unidimensionnels (1D) désordonnés. Cependant, en présence de la corrélation à courte portée, le modèle du dimère aléatoire a constitué une exception à la règle déjà établie par la théorie d'échelle de la localisation. Les notions fondatrices de l'effet dimère sont décrites aussi bien dans le cadre d'une approche de liaisons fortes que celle du modèle de Kronig-Penney. Les propriétés de transmission conventionnelle sont ainsi présentées.

II. Le phénomène de la localisation dans les systèmes désordonnés

2.1 La localisation d'Anderson

La caractérisation des propriétés d'un matériau idéalement ordonné est relativement simple grâce à la présence d'une symétrie de translation à longue portée. Les objets quantiques sont des ondes de Bloch pouvant se déplacer librement, sans restriction dans toute structure ordonnée. Or en réalité, un système idéalement ordonné ne peut exister. Il se trouve que des distorsions apparaissent dans la structure ordonnée par la présence d'impuretés, de dislocations, de lacunes ou de défauts. Pour autant que la concentration de ces éléments reste faible, le principe de développement de la symétrie de translation reste aussi valable dans le cadre de la théorie des faibles perturbations (approximation du potentiel cohérent) [7]. Par contre, dès que la concentration de ces perturbations devient importante, il n'est plus question d'aborder l'aspect perturbation de la symétrie de translation. Une nouvelle approche pour les systèmes désordonnés est donc nécessaire [4].

En partant d'un cristal idéal, les modèles de désordre peuvent être construits de façons différentes. Les systèmes amorphes et verres peuvent être obtenus à partir de la relaxation des paramètres de la structure (désordre spatial) tandis que les alliages sont obtenus à partir de la distribution aléatoire de plusieurs types d'atomes sur un réseau (désordre compositionnel). Le désordre structural est synonyme aux deux types de désordre (spatial et compositionnel) (Voir Fig. I.1).

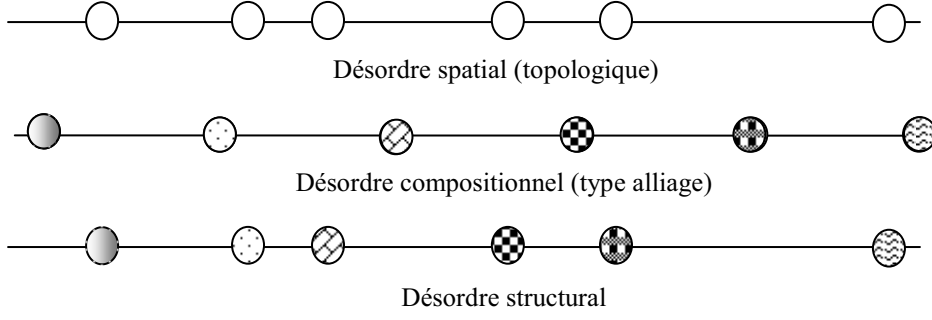


Fig. I.1 Types de désordre dans un système unidimensionnel

La localisation d'Anderson est un phénomène de propagation caractérisé par la présence d'un désordre statique (régime stationnaire) . En 1958, Anderson a montré dans son papier original intitulé : *Absence of diffusion in certain random lattices*, que dans le cas d'un potentiel suffisamment désordonné, les états électroniques relatifs à l'hamiltonien mono électronique stationnaire correspondant, ne pouvaient se propager le long de la structure désordonnée. Les fonctions propres étant confinées sur des régions finies de l'espace, la résistance augmente exponentiellement en fonction de la longueur du système [4].

A une ou à plusieurs dimensions, ce modèle est construit essentiellement sur une approche de la théorie électronique des liaisons fortes: Sur la base des états propres $|i\rangle$ relatifs aux états électroniques dans chaque atome (i), le hamiltonien du système mono électronique s'écrit

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i,j} U_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (\text{I.1})$$

où ε_i , $U_{ij} = \langle i|U|j\rangle$ représentent l'énergie du site $|i\rangle$ et le terme de recouvrement entre sites voisins $|i\rangle$ et $|j\rangle$ respectivement. U étant le potentiel d'interaction entre atomes. Dans le système étudié (à symétrie spatiale cubique), un couplage constant entre premiers plus proches voisins est considéré. Les énergies de sites ε_i sont réparties aléatoirement suivant une distribution rectangulaire de largeur W tel que $-W/2 < \varepsilon_i < +W/2$.

Dans un cristal parfait, le théorème de Bloch permet de montrer que les états électroniques permis (qui reproduisent la périodicité du potentiel) sont étendus. Or dans le cas de systèmes désordonnés, ces états restent étendus en présence d'un faible désordre. La propagation de ces ondes prend un caractère diffusif conformément à la théorie de Bloch-Boltzmann dans les matériaux [2,3] (Figs I. 2 (a) et (b)).

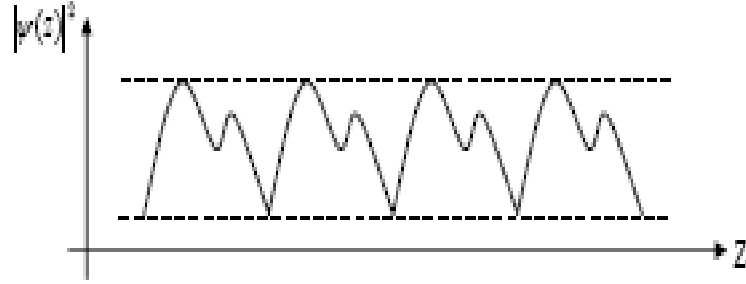


Fig. I. 2(a) Etat propre de Bloch [8]

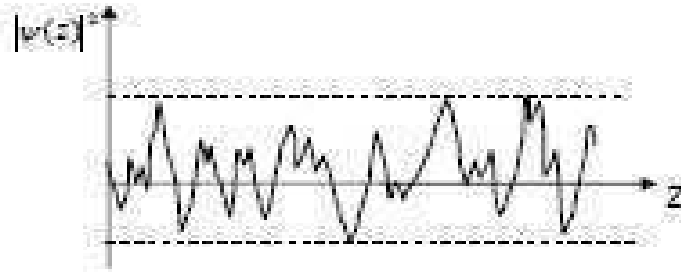


Fig. I. 2(b) Etat propre dans un système faiblement désordonné [8]

Par contre, ceci n'est plus valable dans un système fortement désordonné. Anderson a montré qu'en présence d'un désordre suffisamment fort, les états électroniques deviennent localisés et présentent en conséquence une propagation limitée dans l'espace [5]. Contrairement aux considérations précédentes (pour lesquelles une onde dans un milieu désordonné était vue comme une onde de Bloch ayant perdu sa cohérence spatiale sur des longueurs de l'ordre du libre parcours moyen), ces états propres ont une probabilité de présence importante dans une région finie de l'espace. La fonction enveloppe décroît exponentiellement à partir de certaines positions et devient négligeable au delà d'une longueur caractéristique ξ , appelée longueur de localisation (Fig. I. 2(c)). Dans ces conditions, la fonction enveloppe s'écrit :

$$f(r) \propto e^{-\frac{|r-r_0|}{\xi}} \quad (I.2)$$

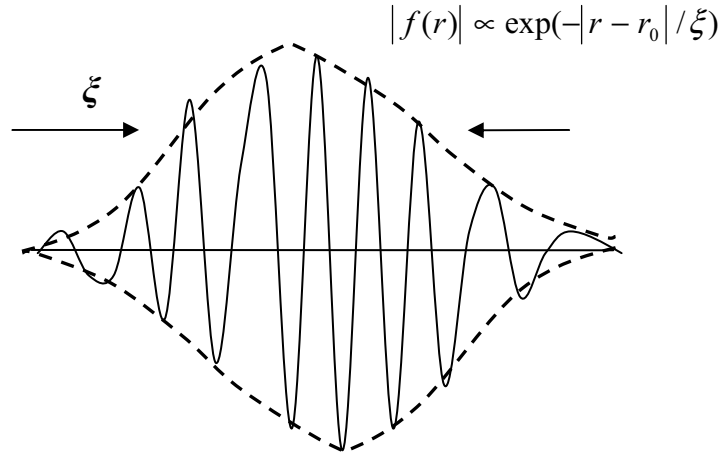


Fig. I. 2(c) Etat propre dans un système suffisamment désordonné. La fonction enveloppe est confinée dans une région finie de l'espace [8]

L'état électronique est d'autant plus localisé que ξ est petit. Ne pouvant surmonter les fluctuations aléatoires du potentiel désordonné et son incohérence spatiale, l'onde électronique se confine totalement sur une région finie de l'espace. Le caractère étendu ou localisé de l'onde dépend de trois paramètres principaux : La dimension spatiale du système, l'énergie de la particule ε_i et le taux de désordre W . Connaissant la nature de l'onde électronique dans les deux cas limites de l'ordre parfait et du désordre total, il est devenu intéressant de décrire les caractéristiques des ondes dans une situation intermédiaire. La nature des états se retrouvant affectée en passant d'un état localisé à un état étendu a permis l'émergence d'une conduction minimale σ_{\min} au front de mobilité. La présence d'états délocalisés dans cette zone à désordre intermédiaire est synonyme d'une transition de phase métal-isolant [9]. (Fig. I. 3)

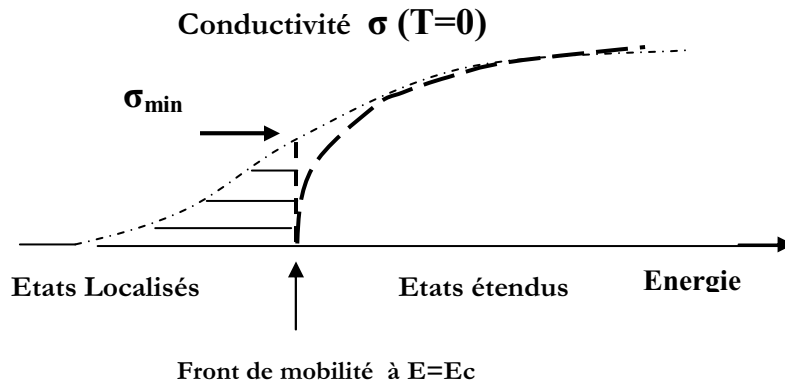


Fig. I. 3. Schéma représentant la notion de front de mobilité [9,10].
Apparition de la discontinuité dans la conductance à l'énergie critique $E=E_c$

Dans les systèmes 3D [10], la conductance minimale

$$\sigma_{\min}^{3D} \approx \left(\frac{1}{3\pi^2} \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{a} \right) \quad (I.3)$$

est définie via un paramètre a représentant une longueur microscopique, proche de l'inverse du vecteur d'onde de Fermi ($a \approx k_f^{-1}$). Quant aux systèmes bidimensionnels (2d) [10], l'observation intéressante a abouti un seuil de mobilité universel:

$$\sigma_{\min}^{2D} \approx 0.1 G_0 \quad (I.4)$$

$G_0 = \frac{e^2}{\hbar}$ est le quantum de conductance tandis que \hbar est la constante de Planck et e représente la charge de l'électron.

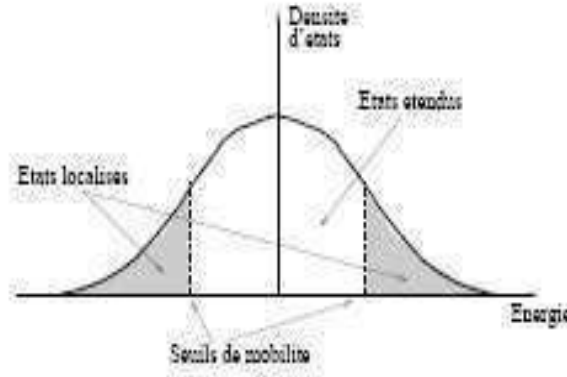


Fig. I. 4 Schéma représentant les seuils de mobilité [8]

Dans les systèmes tridimensionnels (3d), un taux de désordre critique $W_c = 16.3$ a été obtenu : Lorsque $W < W_c$, états localisés et états étendus coexistent. Sur le spectre de la densité d'états, ces états sont séparés par des seuils de mobilités: Les états de bords de bande étant localisés et les états du centre de la bande étendus. Quand W augmente, les bords de bandes se rapprochent vers le centre de la bande et l'atteignent pour $W = W_c$. Au delà, tous les états deviennent localisés. La notion de seuil de mobilité a été introduite par N.F. Mott [9] pour mieux comprendre la transition métal-isolant, telle que observée dans certains semi-conducteurs dopés désordonnés par le changement de la concentration du dopant. Le niveau de Fermi peut franchir le seuil de mobilité, d'où la transition de phase.

2.2 La théorie d'échelle de la localisation d'Anderson

Le concept de la conductance dans les systèmes mésoscopiques désordonnés a été introduit par Thouless [10]. En disposant plusieurs sous-systèmes différents en série, l'idée consistait à définir la conductance comme étant la réponse globale à la susceptibilité des énergies propres à changer en fonction de la variation des conditions de continuité à travers ces portions successives [10,11] : les états propres résultant dans une série de deux sous systèmes successifs dépendent non seulement de la nature de l'état dans chaque sous système mais aussi des conditions de continuité d'un élément à un autre (Figs. I.5 et I.6).

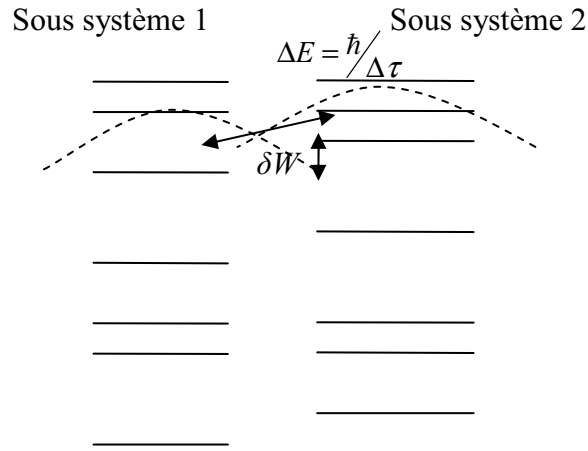


Fig. I. 5. La conductance selon les considérations de Thouless : ΔE est la largeur du niveau électronique et δW est l'espacement énergétique moyen entre niveaux d'énergies à l'interface [11]

Dans l'approche de Thouless, la conductance est décrite à partir le nombre de Thouless proportionnel au rapport $\frac{\Delta E}{\delta W}$, où ΔE est la largeur du niveau électronique relative au temps de transmission dans la sous structure et δW est l'espacement énergétique moyen entre niveaux d'énergies [11]: En particulier, si ΔE est faible par rapport à δW , l'état propre de la structure est plutôt localisé dans son élément d'origine. Etant insensible aux conditions aux limites de la structure globale, la conductance est dans ce cas là exponentiellement faible. Par ailleurs, si δW est négligeable, une situation tendant vers l'ordre est ainsi obtenue : l'état propre correspondant aux échantillons en série, se retrouve en conséquence étendu et projeté sur la base de chaque échantillon et l'aptitude à conduire devient importante. Ainsi, la susceptibilité des niveaux d'énergie aux changements des conditions aux limites d'un échantillon à un autre, apparait comme étant le seul paramètre pouvant contrôler la

nature des états propres pouvant diffuser dans ces systèmes désordonnés. En introduisant la conductance g (sans dimension), Thouless montra que cette grandeur est mesurable sur des systèmes à longueurs finies. La conductance mésoscopique est directement exprimée par le nombre de Thouless via :

$$g = G / G_0 \propto \frac{\Delta E}{\delta W} = \frac{\Delta E}{dE/dN} \quad (I.5)$$

reliant ainsi la nature locale de l'état quasi-lié (à travers ΔE) et la granularité du spectre par le rapport dE/dN dans chaque échantillon. N représentant le nombre d'atome dans l'échantillon.

En 1979, Abrahams et al. [12] ont développé la théorie d'échelle de la localisation, basée essentiellement sur les considérations de Thouless [11]. Le problème consistait à décrire la variation de la conductance en fonction de la taille du système et de sa dimension linéaire pour décrire comment $g(bL)$ dépend de $g(L)$ lorsque la longueur du système passe de L à bL où b est le facteur d'échelle. Abrahams et al. [12] ont proposé une fonction $g(bL)$ dépendant uniquement de $g(L)$ et du facteur d'échelle b , telle que

$$g(bL) = f[(b, g(L))] \quad (I.6)$$

où f est une fonction universelle, dépendant uniquement de la dimension du système considéré. Cette équation, peut également être exprimée d'une manière différentielle en posant : $b = 1 + \varepsilon$ où ε est un paramètre faible devant l'unité.

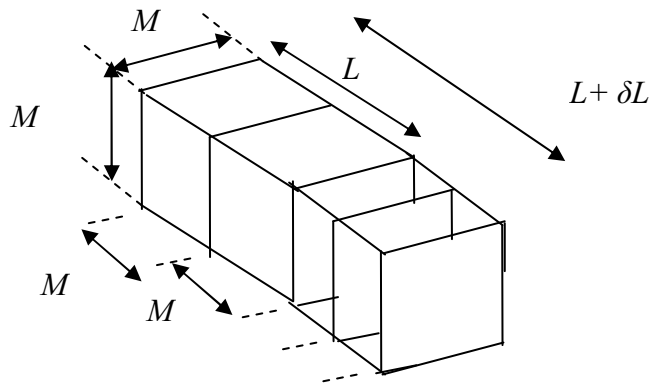


Fig. I. 6 Le principe de base de la théorie d'échelle de la localisation : la variation de la conductance en fonction de la longueur d'un système désordonné.

La théorie d'échelle est valable pour une propagation diffusive des électrons ($L > l_e$ où l_e est le libre parcours moyen). L'idée est que le changement de désordre effectif dans un système lorsque ce dernier devient plus grand, dépend de sa valeur précédente. La seule mesure de ce désordre effectif provient de la conductance sans dimension g . La fonction d'échelle $\beta(g)$ est définie par:

$$\frac{d \ln g(L)}{d \ln L} = \frac{[\partial f(bg)/\partial b]_{b=1}}{g(L)} = \beta[g(L)] \quad (I.8)$$

En supposant la fonction $\beta[g(L)]$ continue et monotone, son comportement qualitatif est déduit par extrapolation, à partir des réponses asymptotiques de la conductance g dans les structures métallique et isolante: Si le système est faiblement désordonné, les lois d'addition des conductances dans le régime métallique (loi d'Ohm) restent valables. La conductance varie en loi de puissance L^{d-2} . En conséquence :

$$\beta(g) = d - 2 \quad (I.9)$$

Par contre, dans le cas des isolants, avec la décroissance exponentielle de g , ($g \propto e^{-\frac{L}{\xi}}$ où ξ est la longueur de localisation), la fonction d'échelle s'écrit :

$$\beta(g) = \ln(g) \quad (I.10)$$

Conformément à ces considérations, la fonction d'échelle $\beta(g)$ est représentée sur Fig. I. 7

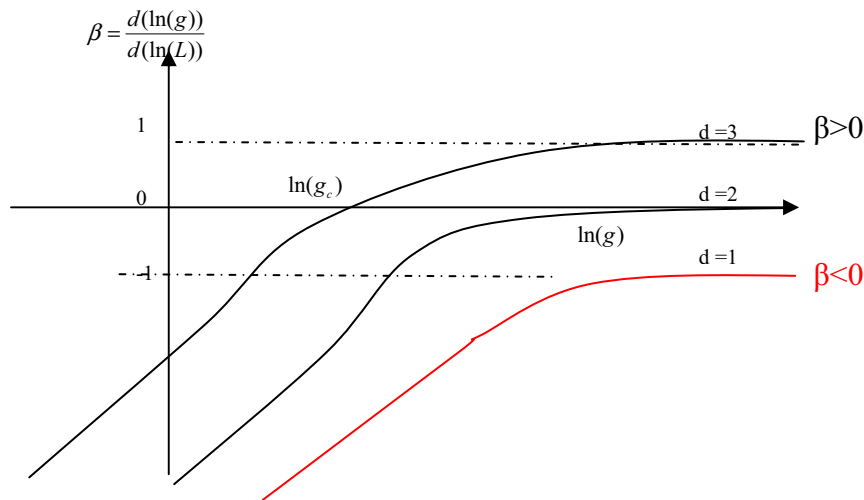


Fig. I. 7 Représentation schématique de la fonction d'échelle $\beta(g)$. L'apparition de la dimension critique $d^*=2$ au delà de laquelle la transition métal-isolant se produit à $g = g_c$. Les systèmes 1D sont localisés ($\beta < 0$) [12]

L'étude de la fonction d'échelle β a permis de mettre en évidence l'existence d'une dimension critique $d^* = 2$ au-delà de laquelle la transition de phase métal-isolant est réalisée. En effet, conformément à Fig. I. 7, la situation ($\beta < 0$) correspond à la décroissance de la conductance en fonction de la taille du système et à la présence uniquement d'états localisés dans toutes les structures désordonnées $1D$ et $2D$. La théorie d'échelle de la localisation à un seul paramètre g a ainsi présenté des arguments pour décrire les propriétés de transmission dans les systèmes désordonnés. En se basant sur l'approche de Landauer dans la description de la conductance à partir des propriétés de la transmission des ondes [13], d'autres travaux ont appuyé les résultats universels de la théorie d'échelle de la localisation d'Anderson à un paramètre (g) dans les systèmes désordonnés $1D$. [14].

III. La suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels par effet dimère

Synonyme d'interférences destructives, le désordre est à l'origine du phénomène de la localisation. La localisation d'Anderson, telle introduite dans le cadre de l'approximation des liaisons fortes, prédit à travers la théorie d'échelle de la localisation l'absence du régime de transmission métallique dans les systèmes unidimensionnels suffisamment longs et désordonnés. Or en présence de corrélation de désordre, des interférences constructives peuvent apparaître. Cette violation des règles établies par la théorie d'échelle de la localisation est présentée à travers le modèle du dimère aléatoire dans les cadres respectifs de la théorie des liaisons fortes et du modèle de Kronig-Penney [15-21]. Une simulation numérique pour le dernier cas permettra de reproduire les réponses de transmission conventionnelles dans le modèle du dimère aléatoire [21].

1. Modèle des liaisons fortes

L'alliage binaire est le système le plus simple pouvant décrire les effets du désordre [15]. Partant du modèle des liaisons fortes, la propagation des ondes a été décrite dans le cas d'un système binaire pour lequel les énergies de site \mathcal{E}_A et \mathcal{E}_B sont réparties aléatoirement sur l'ensemble des sites du réseau. La fonction de distribution correspondante est donnée par :

$$P(\mathcal{E}) = c_A \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_A) + c_B \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_B) \quad (I.11)$$

où c_A et $c_B=1-c_A$ représentent les concentration des éléments A et B respectivement. Le symbole δ décrit la distribution delta de Dirac.

Dans le modèle des liaisons fortes à interactions entre premiers plus proches voisins, l'équation de Schrödinger (Eq. I.1) est donnée par l'équation aux différences finies :

$$(E - \varepsilon_i)c_i - U_{i,i+1}c_{i+1} - U_{i,i-1}c_{i-1} = 0 \quad (\text{I.12})$$

où c_i et c_{i+1} sont les amplitudes de la décomposition de l'onde électronique sur les sites i et $i+1$ respectivement tandis que $U_{ij} = \langle i|U|j \rangle$ représente le terme d'interaction entre les états i et j . U étant le potentiel d'interaction. Cette équation se présente aussi sous la forme matricielle:

$$\begin{pmatrix} c_{i+1} \\ c_i \end{pmatrix} = P_i \begin{pmatrix} c_i \\ c_{i-1} \end{pmatrix} \quad (\text{I.13})$$

où

$$P_i = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_i}{U_{i,i+1}} & -\frac{U_{i,i-1}}{U_{i,i+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.14})$$

est la matrice de passage qui relie les amplitudes des sites voisins $i-1$, i et $i+1$ respectivement.

Dans une série de travaux initiée par le papier original de D.H. Dunlap et al., un modèle non conformiste au point de vue d'Anderson sur la propagation des ondes électroniques dans les systèmes 1D désordonnés a été proposé [16,17] : En faisant apparaître le défaut par paires aléatoires dans toute la structure hôte, une corrélation à courte portée est ainsi imposée au désordre donnant lieu au modèle du dimère aléatoire.

Pour déterminer les réponses de localisation dans ce modèle, il était instructif d'analyser les propriétés de réflexion à travers ce défaut, telles que établies dans le cadre de la théorie des liaisons fortes [17]: En plaçant un défaut dimère aux sites d'indices $n = -1, 0$ sur une chaîne linéaire infinie, les conditions aux limites autour du motif permettent d'écrire :

$$c_n = \begin{cases} e^{ik_n} + r e^{-ik_n} & \text{pour } n < -1 \\ \tau e^{ik_n} & \text{pour } n \geq 1 \end{cases} \quad (\text{I.15})$$

k_n étant le vecteur d'onde sur chaque cellule d'indice n . En considérant une interaction avec seulement les premiers plus proches voisins ($\bar{U} = U_{i,i+1} = U_{i,i-1}$), les amplitudes de transmission τ et de réflexion r sont obtenues de l'application des conditions de continuité à travers le motif défaut dimère:

$$c_0 = 1 + r = \tau(\varepsilon_- e^{ik} + \bar{U}) / \bar{U} \quad (\text{I.16})$$

avec

$$\varepsilon_- = \varepsilon_A - \varepsilon_B \quad (\text{I.17})$$

Le coefficient de réflexion peut être déterminé à partir de la relation

$$R = |r|^2 = \frac{\varepsilon_-^2 (\varepsilon_- + 2\bar{U} \cos(k))^2}{\varepsilon_-^2 (\varepsilon_- + 2\bar{U} \cos(k))^2 + (2\bar{U}^2 \sin(k))^2} \quad (\text{I.18})$$

En conséquence, la transparence totale du dimère défaut est obtenue lorsque :

$$\varepsilon_- + 2\bar{U} \cos(k) = 0 \Rightarrow \varepsilon_b = \varepsilon_A + 2\bar{U} \cos(k) \quad (\text{I.19})$$

L'appartenance de l'énergie de site ε_B à la bande permise du réseau hôte (A) (Eq. (I.19)), montre l'existence d'un vecteur d'onde particulier k_0 (vérifiant $k_0 = \cos^{-1}(\varepsilon_B - \varepsilon_A / 2\bar{U})$) pour lequel le motif dimère est totalement transparent.

Par ailleurs, pour un tel défaut (noté d), la matrice de passage du dimère $P_d(E)$ se présente en fonction de celle du défaut $P_B(E)$ sous la forme:

$$P_d(E) = P_B^2(E) = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_B}{\bar{U}} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (\text{I.20})$$

A un signe près, celle-ci est équivalente à la matrice identité:

$$P_d(E) = -I \quad \text{lorsque } E = \varepsilon_B \quad (\text{I.21})$$

L'équation (I.18) présente aussi un autre cas de transparence si $\varepsilon_- = 0$. Correspondant à une situation similaire à celle d'un ordre parfait ($\varepsilon_A = \varepsilon_B$), les matrices de passage relatives aux éléments hôte et défaut deviennent équivalentes:

$$P_B(E) = P_A(E) \quad (\text{I. 22})$$

Partant de ces deux cas possibles (Eqs. I.21 et I.22), la condition de transparence du motif défaut dimère, a été démontrée par H-L Wu et al. dans le cadre exclusif de l'approximation des liaisons fortes et puis généralisée à d'autres types de corrélations de désordre binaires. La condition généralisée des résonances est donnée par :

$$P_d(E) = \eta_1 P_A(E) + \eta_2 I \quad (\text{I. 23})$$

où η_1 et η_2 sont deux constantes numériques [17]. Partant de cette idée de décomposition sur l'ensemble des résonances probables, X.Q. Huang et al. ont obtenu analytiquement des expressions universelles représentant les énergies de résonance correspondant à des défauts présentant des symétries internes [18]. Les fonctions enveloppes pour des systèmes apériodiques et autres aléatoires à désordre corrélé ont ainsi été décrites et utilisées comme critère de (dé)localisation dans ces structures 1D particulièrement désordonnés [18,19].

2. Modèle électronique de Kronig-Penney

Le modèle de Kronig-Penney est une autre approche mathématique permettant de déterminer la structure de bandes d'énergie dans un profil de potentiel périodique. Etabli sur une base de fonctions d'ondes planes, ce modèle exprime la reproduction périodique des conditions de continuité telles définies sur une cellule élémentaire. Une alternance de bandes permises et de bandes interdites est ainsi obtenue [20]. (voir Annexe I.)

L'objectif de cette section consiste à définir la condition de la suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels par la corrélation du désordre binaire à courte portée (effet dimère) dans le modèle de Kronig-Penney. Dans cette partie, nous reproduisons l'approche conventionnelle de l'effet dimère telle étudiée numériquement par E. Sanchez et al. [21].

a -Etude de la propagation des ondes électroniques dans un système binaire désordonné : L'effet dimère conventionnel

Considérons un électron de vecteur d'onde k se déplaçant dans une chaîne linéaire 1D ordonnée. Le réseau hôte dont la cellule unité (désignée par (A)) est de symétrie de translation de période d :

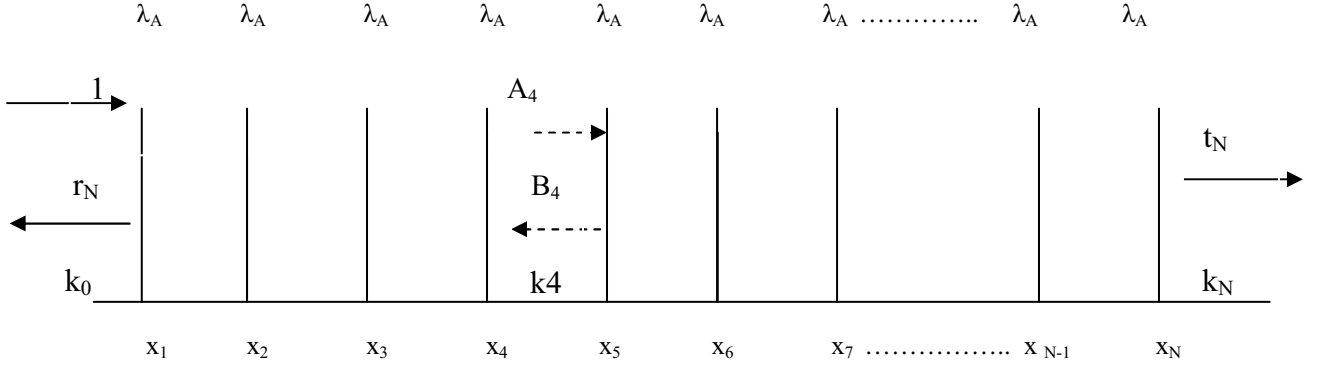


Fig. I.7(a) Représentation schématique du modèle de Kronig-Penney à distribution delta de Dirac

Dans ce système ordonné, le potentiel diffuseur est défini par une série de distribution delta de Dirac :

$$V(x) = \sum_n \lambda_n \delta(x - x_n) \quad (\text{I. 24})$$

où le paramètre $\lambda_n = \lambda_A$ constitue l'intensité du pic, tandis que $x_n = nd$ représente les sites réguliers du réseau. Pour ce système totalement ordonné, le motif (caractérisé par λ_A et d) définit l'équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney relative au motif (A). Celle-ci est décrite par :

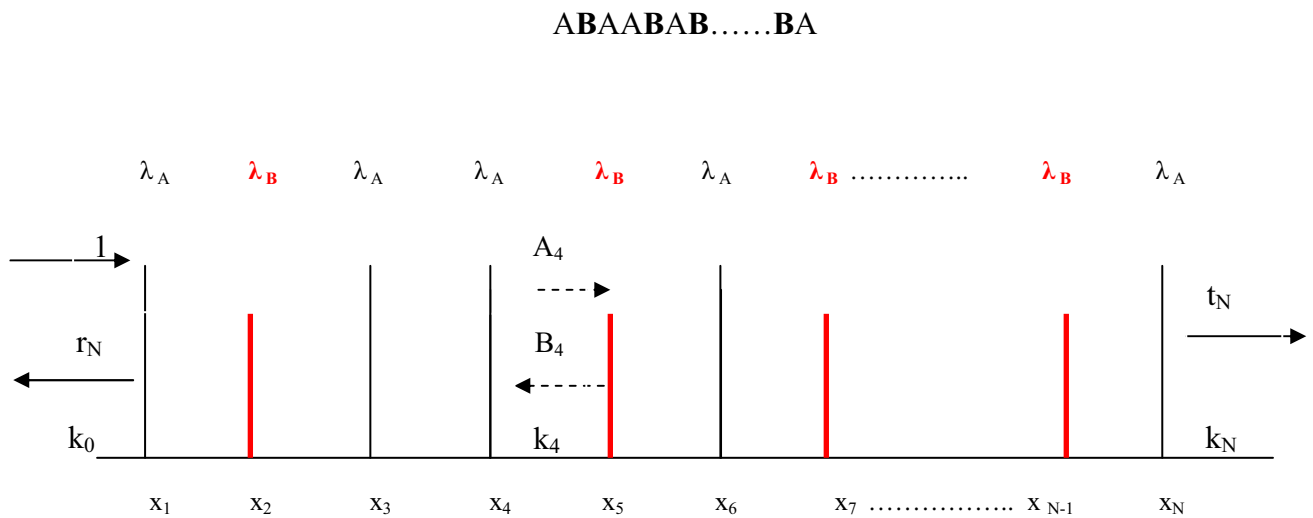
$$\kappa_A(k) = \cos(kd) + \frac{\lambda_A}{2k} \sin(kd) \quad (\text{I. 25})$$

où $\kappa_A(k)$ traduit la relation de dispersion correspondante (voir Annexe I.). Ce modèle est une limite du modèle conventionnel de Kronig-Penney à barrières rectangulaires lorsque les épaisseurs sont considérées nulles [20]

Les paramètres structuraux de la cellule conditionnent l'alternance des bandes permises et interdites dans la structure de bandes. La bande permise (interdite) est obtenue lorsque $|\kappa_A(k)| < 1$. ($|\kappa_A(k)| > 1$) tandis que la condition $\kappa_A(k) = \pm 1$ délimite les bords de bandes correspondantes.

Pour rendre compte d'un désordre structural, considérons l'alliage binaire désordonné (AB), construit à partir l'introduction dans le réseau hôte (A) d'un nombre fini d'éléments (B), défauts dont l'intensité du pic est λ_B , préservant la même périodicité d . Le désordre dans ce système binaire aléatoire peut être considéré selon deux configurations différentes :

- Le désordre binaire non corrélé est obtenu lorsque l'élément B est généré de manière totalement aléatoire sur le réseau hôte :



- Le désordre binaire corrélé à courte portée (ou le modèle du dimère aléatoire) consiste à disposer l'élément B par paires aléatoires (sans effet d'agrégats) dans le sous-réseau hôte :

BBAAABBAAA

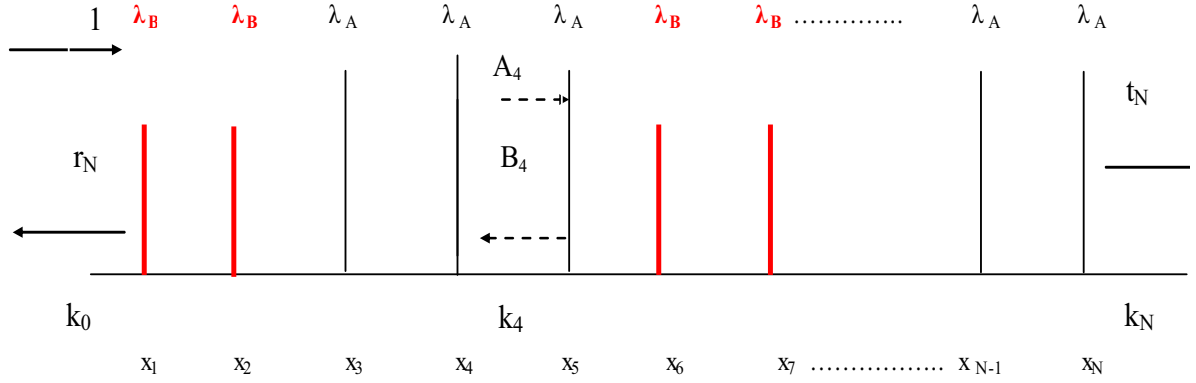


Fig. 7(c). Représentation schématique du désordre binaire corrélé à courte portée

1. Diffusion à travers un défaut dimère

Soit un électron de vecteur d'onde k appartenant à une bande permise du réseau hôte (A). Dans ce cas, l'équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney (Eq. I.25) doit vérifier :

$$\left| \cos(kd) + \frac{\lambda_A}{2k} \sin(kd) \right| \leq 1 \quad (\text{I.26})$$

A partir de l'équation de Schrödinger mono-électronique correspondante de potentiel $V(x)$,

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \sum_n \lambda_n \delta(x - nd) \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (\text{I.27})$$

les conditions de continuité de la fonction d'onde $\psi(x)$ et de sa dérivée $\psi'(x)$ d'un site à un autre permettent de mettre en évidence la formule de Poincaré [21,23] (Voir Annexe I.2). Apparaissant sous une forme tri-réursive :

$$\psi_{n+1}(x) = 2 \kappa_n \psi_n(x) - \psi_{n-1}(x) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} \psi_{n+1}(x) \\ \psi_n(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\kappa_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n(x) \\ \psi_{n-1}(x) \end{pmatrix} \quad (\text{I.28})$$

l'évolution spatiale de l'onde électronique à travers les sites du réseau peut ainsi être décrite.

Dans le cas de la présence d'un motif dimère défaut (BB), situé sur deux sites successifs m et $m+1$:

$$\lambda_n = \begin{cases} \lambda_B & \text{si } n = m, m+1 \\ \lambda_A & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{I.29})$$

l'application consécutive de la formule de Poincaré sur les trois sites successifs: $n = m-1, m, m+1$ et l'élimination des termes ψ_m et ψ_{m+1} relatifs à la position du motif dimère, aboutissent à l'expression :

$$-\psi_{m+2} = [2\kappa_A + 2\kappa_B + ((2\kappa_B)^2 (2\kappa_A))] \psi_{m-1} + (1 - (2\kappa_B)^2) \psi_{m-2} \quad (\text{I.30})$$

A un signe près (dû au terme de déphasage de π), cette équation devient équivalente à celle d'une structure ordonnée (Eq. I. 28), indépendante de la présence du défaut dimère (situé sur les sites $n = m, m+1$) lorsque la condition de la transparence conventionnelle :

$$\kappa_B(E) = 0 \quad (\text{I.31})$$

est vérifiée. Par ailleurs, sachant que pour un motif dimère, la matrice de passage s'écrit :

$$P_d = \begin{pmatrix} 2\kappa_B & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (\text{I.32})$$

celle-ci se réduit à un signe près, à la matrice identité I:

$$P_d = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = -I \quad (\text{I.33})$$

Dans une représentation de produits successifs de matrices de passage, le défaut dimère est décrit par une matrice neutre. De ce fait, la condition conventionnelle

$$|\kappa_A(k_r)| \leq 1 \text{ et } \kappa_B(k_r) = 0 \quad (\text{I.34})$$

suffit pour réaliser une situation de transparence du défaut dans toute la structure, donnant lieu à un système désordonné dont la configuration est similaire (mais pas identique) à celle d'un système ordonné [16-19, 21].

2. Diffusion sur un réseau d'alliage binaire.

Dans cette section, nous nous intéressons à travers une simulation numérique à l'étude de la transmission d'une onde électronique d'énergie incidente E sur un système 1D de longueur L . Nous envisageons de résoudre l'équation de Schrödinger (Eq. I.27) et de décrire des propriétés de transmission pour un alliage binaire, dont la fonction de distribution est donnée par :

$$P(\lambda_n) = c_A \delta(\lambda_n - \lambda_A) + (1 - c_A) \delta(\lambda_n - \lambda_B) \quad (\text{I.35})$$

où λ_A et λ_B représentent les intensités de pics des cellules hôte et défaut respectivement. Les défauts B apparaissent dans la chaîne avec la concentration $c_B = 1 - c_A$. c_A étant la concentration des éléments hôtes.

Conformément au papier de E. Sacher et al.[21], les deux types du désordre binaires aléatoires sont considérés. L'effet dimère est examiné dans le but de montrer l'apport de la corrélation du désordre à courte portée sur les propriétés de transmission des systèmes binaires non corrélés. Le système d'unités ($\frac{\hbar^2}{2m} = 1$) a été considéré. Les énergies sont données en eV et les distance en Å.

Le système physique étudié contient $N = 10\,000$ éléments diffuseurs espacés d'un pas de réseau unité ($d = 1$). Les cellules hôte et défauts sont caractérisés par $\lambda_A = 1.0$ et $\lambda_B = 1.5$ respectivement alors que $c_B = 0.20$. En utilisant le formalisme de la matrice de transfert, les réponses statistiques moyennes du coefficient de transmission $\langle T \rangle$ et de la longueur de localisation $\langle \xi \rangle$ (à travers la définition du coefficient de Lyapunov réduit $\frac{L}{\xi} = -\frac{1}{2} \log(T)$) sont déterminées sur un nombre suffisamment grand de configurations équivalentes au même désordre [22]. Dans notre travail, le nombre maximum de configurations est déterminé par la condition de tolérance suivante :

$$\left| \frac{\langle T_n \rangle - \langle T_{n-1} \rangle}{\langle T_{n-1} \rangle} \right| < 0.01 \quad (\text{I.36})$$

où $\langle T_n \rangle$ définit la valeur moyenne du coefficient de transmission à la $n^{\text{ème}}$ itération.

La figure I.8(a), montre le comportement du coefficient de transmission moyen $\langle T(E) \rangle$ en fonction de l'énergie incidente E pour les désordres binaires corrélé et non corrélé. En tant que source d'interférences destructives sur l'onde incidente, l'effet du désordre non corrélé apparaît à travers les faibles transmissions enregistrées sur l'ensemble du domaine d'énergie considéré. Le désordre non corrélé présent dans la structure ($N = 10\,000$ et $c_B = 0.20$) est suffisamment contraignant pour la propagation des ondes électroniques.

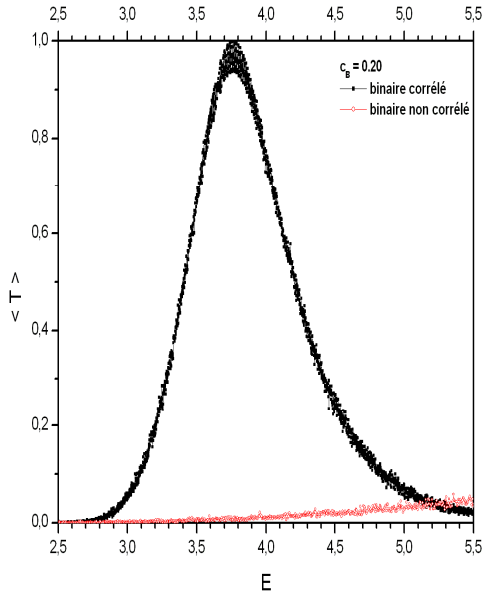
Tous les états sont localisés ($1 < \left\langle \frac{L}{\xi(E)} \right\rangle$) (voir Fig. I. 8(b).)

D'autre part, la présence de la corrélation dans le désordre binaire à courte portée, provoque l'apparition d'une mini-bande d'états délocalisés ($\left\langle \frac{L}{\xi(E)} \right\rangle < 1$) autour de l'énergie de résonance $E_r = 3.7626$ dont la transmission moyenne $\langle T(E_r) \rangle \approx 1$. Au fur et à mesure que l'énergie incidente s'éloigne de la résonance, l'onde incidente se retrouve affectée par le désordre jusqu'à atteindre des transmissions quasi insignifiants aux bords de la mini-bande. A la résonance, l'état le plus étendu est obtenu ($\left\langle \frac{L}{\xi(E_r)} \right\rangle \approx 5.10^{-4}$)

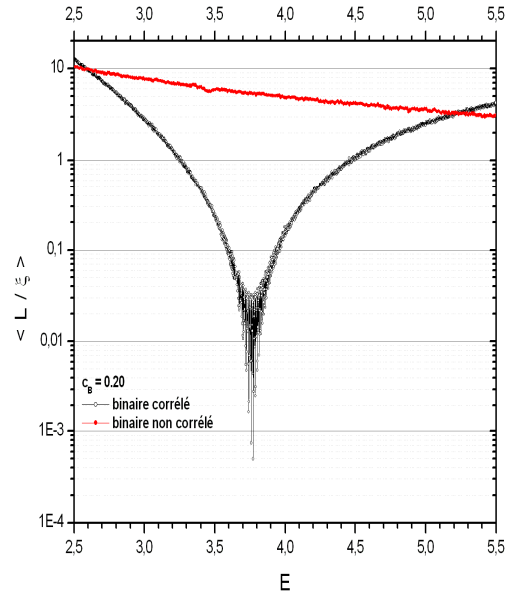
L'énergie de résonance E_r qui vérifie la condition de résonance conventionnelle (Eq. I.34):

$$\kappa_B(E_r) = 0 \Leftrightarrow \frac{\tan(\sqrt{E_r})}{\sqrt{E_r}} = \frac{-2}{\lambda_B} \quad (\text{I.37})$$

est une grandeur intrinsèque au motif défaut B. De ce fait, la variation du taux du désordre, (la taille du système N et / ou la concentration des défauts c_B), n'influe que sur l'allure de la courbe de transmission autour de la résonance E_r . Comme indiqué sur Fig. I.9, l'augmentation du taux du désordre provoque plus de contraintes à la propagation de l'onde électronique au delà du domaine avoisinant l'énergie de résonance E_r , présentant des profils de transmission de plus en plus fins. La localisation d'Anderson est ainsi accentuée en dehors de la résonance avec des modes de transmission plus localisés.

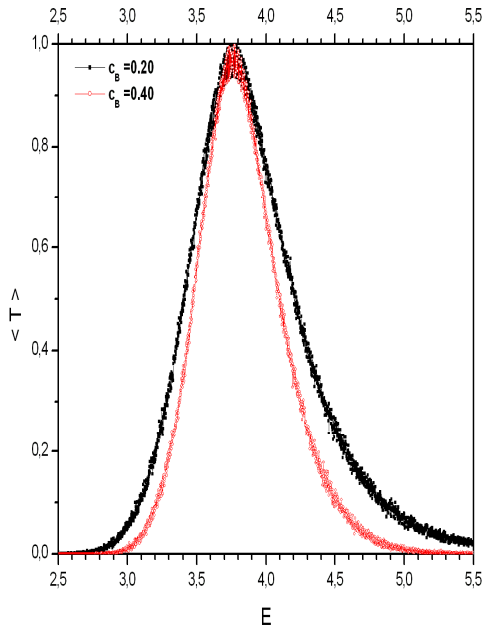


(a)

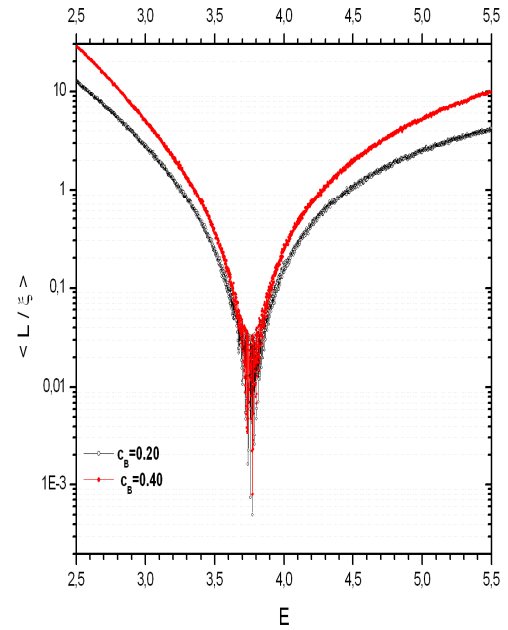


(b)

Fig. I.8 Réponses moyennes de la transmission et du coefficient de Lyapunov réduit pour les deux cas du désordre binaires : corrélé (noir) et non corrélé (rouge) [21]



(a)



(b)

Fig. I.9 Réponses moyennes de la transmission (a) et du coefficient de Lyapunov réduit (b) pour deux concentrations différentes : $c_B = 0,20$ (noir) et $c_B = 0,40$ (rouge) du désordre binaire corrélé [21].

Le comportement de l'onde incidente le long du milieu de propagation est aussi décrit à partir de la résistance de Landauer (mesurée en unité $(1/G_0)$) [13,23,24]:

$$\rho(E) = \frac{R(E)}{T(E)} = \frac{1-T(E)}{T(E)} \quad (I.38)$$

Définie à partir des réponses de la transmission, celle-ci permet aussi de traduire les effets de la diffusion de l'onde électronique à travers le milieu de propagation. A la résonance dimère, le milieu devient faiblement résistif ($\rho_{\text{dim}er}(E_r) \approx 10^{-4}$). Pour les paramètres utilisés, ceci correspond à $\rho_{\text{dim}er}(E_r) \approx 10^{-11} \rho_{nc}(E_r)$. L'indice nc correspond au cas du désordre binaire non corrélé (voir courbe rouge Fig. I.10).

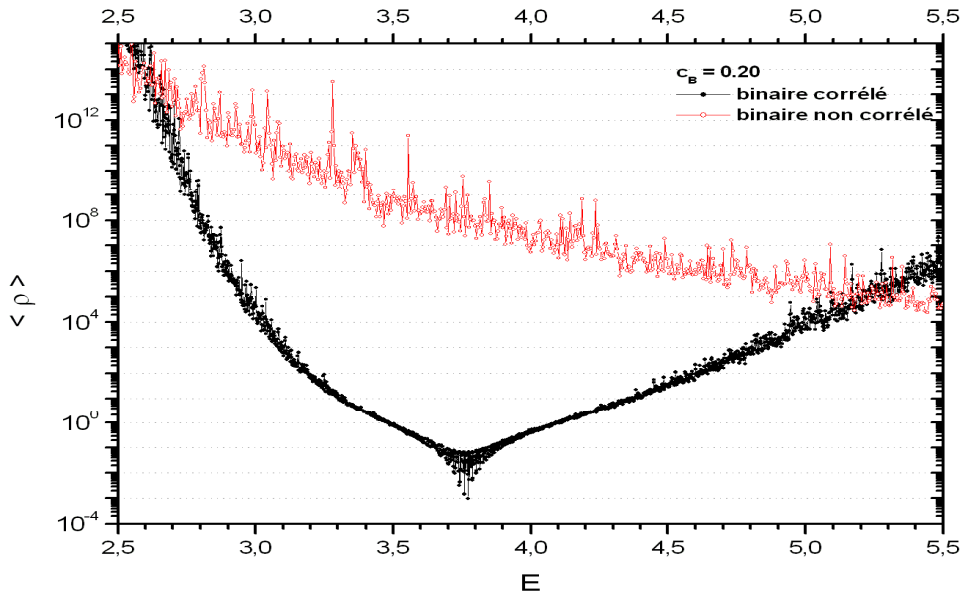


Fig. I.10 Réponses moyennes de la résistance de Landauer pour les deux cas du désordre binaires corrélé ρ_c (noir) et ρ_{nc} non corrélé (rouge) [21].

Dans le but de consolider la nature étendue de l'état propre résonant, rappelons que le comportement du coefficient de transmission $\langle T(N) \rangle$ en fonction de la taille du système (mesurée en nombre totale de défauts N) permet de décrire qualitativement la fonction enveloppe de l'onde électronique. A la résonance ($E_r = 3.7626$), la fonction enveloppe prend l'allure d'une fonction périodique à amplitude uniforme, similaire à celle d'une onde de Bloch (Fig. I. 11). La transparence de motif dimère dans toute la structure, reproduit une situation semblable (mais pas identique) à celle d'un ordre parfait (à un signe près dans Eq. I. 30). Le caractère diffusif de l'onde électronique est ainsi reproduit dans ces systèmes particulièrement désordonnés.

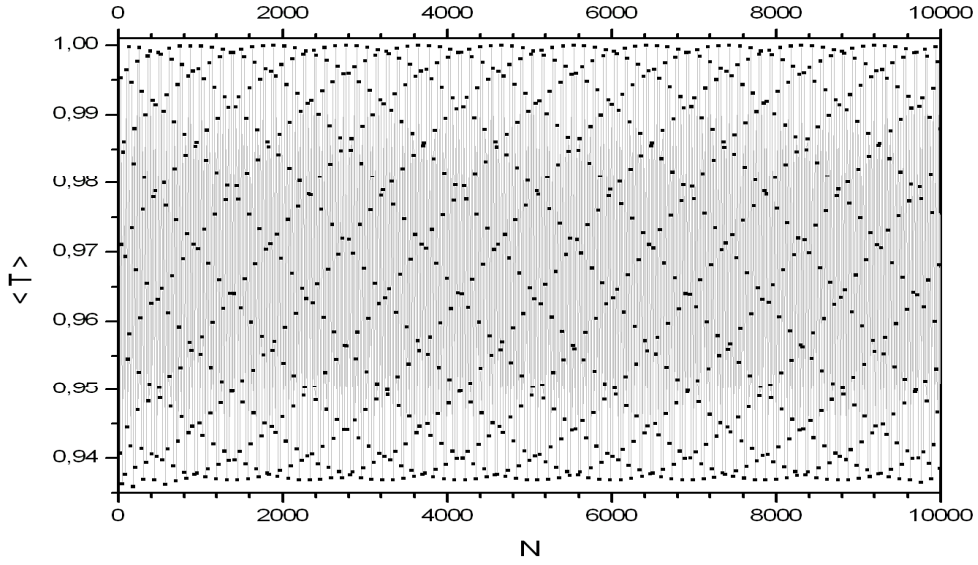


Fig. I.11. Réponse moyenne de la fonction enveloppe à la résonance dimère conventionnelle ($E_r = 3.7626$).

Ce comportement périodique semblable à celui d'une onde de Bloch se reflète aussi sur la réponse moyenne de la résistance en fonction de la taille du système $\langle \rho(N) \rangle$. On note qu'à l'énergie de la résonance, la résistance est assez sensible à la variation de la taille du système. La résistance va de la faible valeur maximale $\rho_{\max} = 0.07$ (dépendant de l'intensité du motif hôte λ_A) et peut atteindre des valeurs minimales singulières allant jusqu'à $\rho_{\min} \approx 1.0 \cdot 10^{-7}$, sur des longueurs régulières.

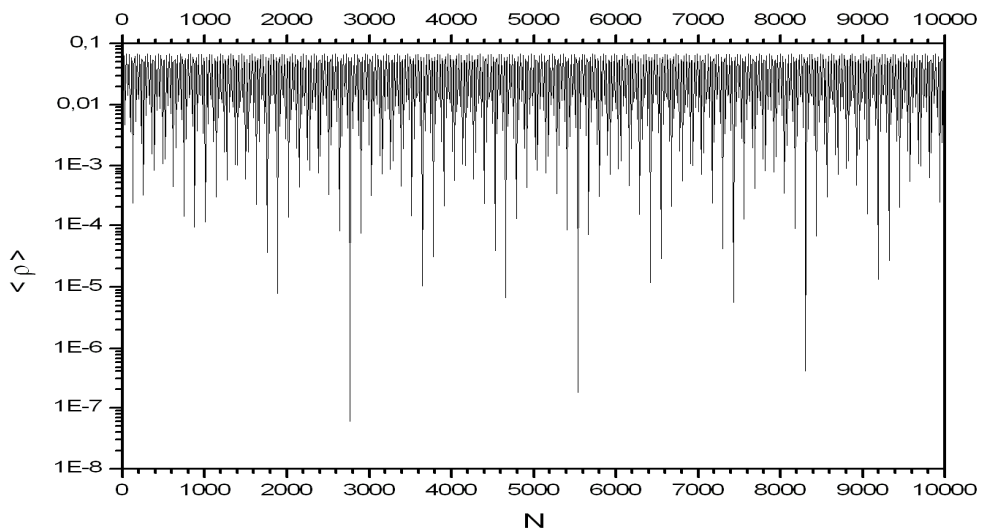


Fig. I.12. Réponse moyenne de la résistance de Landauer en fonction de la taille du système à la résonance dimère conventionnelle ($E_r = 3.7626$)

Des modes similaires à ceux de Bloch peuvent ainsi caractériser ces systèmes particulièrement désordonnés à la résonance de transparence du motif dimère . Pour des longueurs de systèmes particulières, le dispositif devient tellement conducteur que la transmission est susceptible de se produire de manière quasi-balistique.

III. Conclusion

Un aperçu historique sur l'évolution des notions fondamentales des propriétés de transmission dans les systèmes désordonnés a été présenté. En se basant sur la théorie d'échelle de la localisation à un paramètre (la conductance sans dimension g), il a été postulé que dans la limite thermodynamique, tous les modes de transmission 1D sont localisés.

Or avec l'apparition de mini-bandes d'états délocalisés dans le modèle du dimère aléatoire, des états étendus sont restaurés autour de résonances dont les énergies sont caractéristiques aux situations de transparence du motif dimère défaut considéré. A la résonance dimère, des états semblables aux ondes de Bloch sont ainsi obtenus.

IV. Bibliographie

1. F. Bloch , Z. phys. **52**, 555 (1928)
2. M.P. Marder, *Condensed Matter physics*, Wiley Interscience publication, New York (1999)
3. M. Di Vantra , *Electrical transport in Nanoscale systems*, Cambridge university press, New York (2008)
4. P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)
5. I. M. Lifchitz, S.A. Gradeskul, L.A. Pastur , *Introduction to the theory of disordered systems*, Wiley interscience publication, New York (1988)
6. P. Sheng, *Scattering and localization of classical waves in random media*, World Scientific, Singapore, (1990).
7. R. Elliot, J.A. Krumhansl and P. L. Leath, Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974)
8. P.A. Lee, and T.V. Ramakrishnan , Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985); B. Kramer and A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993)
9. N.F..Mott, J. Non-Crys. Solids **1**, 1(1968); in *Electronics and Structural Properties of Amorphous Semi Conductors*, p1, Academic Press, London (1973). N.F. Mott and E.A.Davids, *Electrical Process in Non-Crystalline Materials* , 2nd Ed., Calrendon, Oxford (1979)
10. T. Edwards and D.J. Thouless, J. Phys. C **5**, 807 (1972], D.C. Licciardello and D.J. Thouless, J. Phys. C **8**, 4157 (1975); Phys. Rev. Lett. **35**, 1475 (1975).
11. D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett.**39**, 1167 (1977).
12. E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
13. R. Landauer, Philo. Mag. **21**, 863 (1970); A. Douglas Stone and A. Szafer, IBM J. Res. Develp.**33**, 384 (1988); Y. Imry and R. Landauer, Rev. Mod. Phys. **71**, 306 (1999).
14. P.W. Anderson, D.J. Thouless, E. Abrahams and D.S. Fisher, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980) , P.W. Anderson, Phys. Rev. B **23**, 4828 (1981).
15. E..N. Economou, C.M. Soukoulis and M.H. Cohen, Phys. Rev. B **37**, 4399 (1988)
16. D. H. Dunlap, H-L Wu and P. Phillips, Phys. Rev. Lett.**65**, 88 (1990), H-L Wi and P. Phillips , J. Chem. Phys.**93**, 7369 (1990), Science **252**, 1805 (1991)
17. H-L Wu , W. Goff and P. Phillips , Phys. Rev. B **45**, 1623 (1992)

18. X.Q. Huang, S.S. Jiang, R.W. Peng, Y.M. Liu, F. Qiu and A. Hu , Mod. Phys. Lett. B. **17**, 1461(2003)
19. M. Hilke, J.C. Flores, and F. Dominguez-Adame, phys. Rev. B **58**, 8837 (1998); X. Huang, X. Wu and C. Gong , Phys. Rev. B **55**, 11018 (1997)
20. H. Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et composants électroniques*, édition Masson, Paris, France(1996) ; J. Cazaux, *Initiation à la physique du solide. Exercices commentés*, édition Masson, Paris, France (1981) ; C. Kittel, *Introduction à la physique du solide*, Editions Dunod, Paris, France (1996)
21. A. Sanchez, E. Macia and F. Dominguez-Adame, Phys. Rev. B **49**, 147 (1994).
22. J.M.Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels*, Alea-Saclay collection, Paris, (1992).
23. S. Datta , *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge university press, Cambridge, England (1995)
24. Y. Imry, *Introduction to mesoscopic physics*, Oxford university press, Oxford England (2000).

Chapitre 2

Propagation des ondes mécaniques dans les chaînes aléatoires à désordre binaire corrélé

Chapitre 2

Propagation des ondes mécaniques dans les chaînes aléatoires à désordre binaire corrélés

I	Introduction	44
II	Etude de la propagation des ondes mécaniques dans les systèmes 1d	51
II.1	Le système de la corde vibrante chargée en masses.....	51
	A. Description de l'ordre parfait.....	51
	B. Etude du désordre compositionnel de masse.....	57
	1. Cas des composants binaires non corrélés	57
	a-Description des coefficients de transmission et de Lyapunov réduit	57
	b-Description de la nature des modes de transmission.....	60
	c-Conclusion.....	61
	2. Cas des composés binaires corrélés à courte portée : effet dimère.....	62
	a-Description des coefficients de transmission et de Lyapunov réduit	62
	b-Description de la nature des modes de transmission.....	66
	c-Conclusion.....	68
II.2	Le système de la corde vibrante chargée en résonateurs masses-ressorts.....	69
	A-Description d'un ordre parfait.....	70
	B-Etude des systèmes binaires désordonnés.....	73
	1. Nature des modes de transmission résonants	78
	2. La transmission balistique dans le modèle du dimère aléatoire	79
	a-La résonance de la commutation balistique.....	80
	b-La résonance dimère balistique.....	85
	c-Conclusion.....	88
	d-Application : Etude des filtres optiques balistiques.....	89
	1. La configuration dimère I.....	93
	2. La configuration dimère II.....	96
	3. La configuration dimère balistique dans un alliage hôte désordonné	97
	4. Conclusion.....	102
III.	Conclusion générale.....	103
	Tableaux récapitulatifs	105
IV.	Bibliographie	106

Par analogie au modèle électronique de Kronig-Penney à distribution de Dirac, la propagation des ondes mécaniques dans les systèmes unidimensionnels aléatoires à désordre corrélé est examinée dans ce chapitre. Les propriétés de transmission par effet dimère sont décrites dans un système classique d'une corde vibrante homogène, uniformément tendue sur laquelle est disposé à des positions régulières un désordre corrélé de masses.

L'insertion appropriée d'un ressort au niveau de chaque élément diffuseur (masse hôte et / ou masse défaut), nous permettra de décrire les améliorations susceptibles d'apparaître sur les réponses de la transmission - à la résonance dimère conventionnelle - lorsque la corde vibrante est soumise à des manipulations intentionnelles du désordre de masse et / ou de ressort : Une optimisation des performances de transmission des filtres mécaniques basée sur l'effet dimère balistique est présentée. La même approche est appliquée aux structures à alliages hôtes désordonnés.

I. Introduction

La propagation et la dispersion des ondes dans les milieux ordonnés ont été largement étudiées depuis les travaux de Brillouin dans le milieu du 20^e siècle [1]. A partir du théorème de Bloch [2], l'analyse des relations de dispersion obtenues sur les cristaux électroniques, a montré la formation d'une structure de bandes d'énergie pour laquelle bandes permises et interdites sont alternées dans le spectre de transmission. La résolution de l'équation de Schrödinger nécessite aussi une approche ondulatoire, semblable. Ainsi l'équivalence classique permet d'approcher le problème théorique de la mécanique quantique en fournissant un moyen supplémentaire, macroscopique - et parfois - expérimental pour observer et mieux comprendre le phénomène physique considéré.

L'analogie classique établie sur les phénomènes mésoscopiques quantiques provient des travaux de S. He et J.D. Maynard [3,4] : En reproduisant du mieux possible la physique mésoscopique fondamentale sur une échelle macroscopique, des systèmes équivalents peuvent être élaborés. La main mise sur les paramètres intrinsèques définissant le potentiel de ces systèmes classiques, un control total sur la fiabilité de la mesure des réponses macroscopiques (valeurs propre de transmission, vecteur propres, coefficient de transmission, longueur de localisation, déphasage etc.) peut ainsi être obtenu.

D'une part, l'analogie mathématique entre onde électronique et onde mécanique est décrite comme suit : Les fonctions d'onde résultant de la superposition des modes propres, évoluent en $e^{i\frac{E_n t}{\hbar}}$ pour les électrons et en $e^{i\omega_n t}$ pour les ondes sonores. L'équation de Schrödinger électronique

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right] \psi_k = E(k)\psi_k \quad (\text{II.1})$$

devient équivalente à l'équation du mouvement classique

$$\Delta\psi_q + (q^2 - V(r))\psi_q = 0 \quad (\text{II.2})$$

pour laquelle le vecteur d'onde électronique $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} E$ est remplacé le vecteur d'onde

classique équivalent $q = \frac{\omega}{v_\phi}$. Le paramètre v_ϕ représente la célérité de l'onde propagatrice,

telle qu'identifiée dans l'équation de la propagation de l'onde classique dans son milieu correspondant. D'autre part, contrairement à la complexité des potentiels quantiques, le potentiel classique peut être aisément déterminé à partir de la combinaison de densité de masses et de raideur déduites à partir des lois de la mécanique acoustique [5]. Dans le cas des systèmes de chaines harmoniques, la résolution de l'équation de Schrödinger se présente sous une formulation analytique : En se basant sur une approche équivalente à celle des liaisons fortes dans les systèmes électroniques, deux masses voisines couplées par la présence d'un potentiel d'interaction, vibrent en modes normaux symétrique et anti symétrique, résultant de la combinaison des modes propres individuels. Si N éléments identiques existent dans le système ordonné, N modes normaux et N fréquences propres en résulteront dans chaque bande permise. La disposition de ces modes à l'intérieur de la bande permise ainsi que sa largeur dépendent évidemment de l'intensité de l'interaction (taux de couplage) entre plus proches voisins. C'est le principe de la formation en structure de bandes d'énergie dans le modèle des liaisons fortes (voir Fig. II.1)

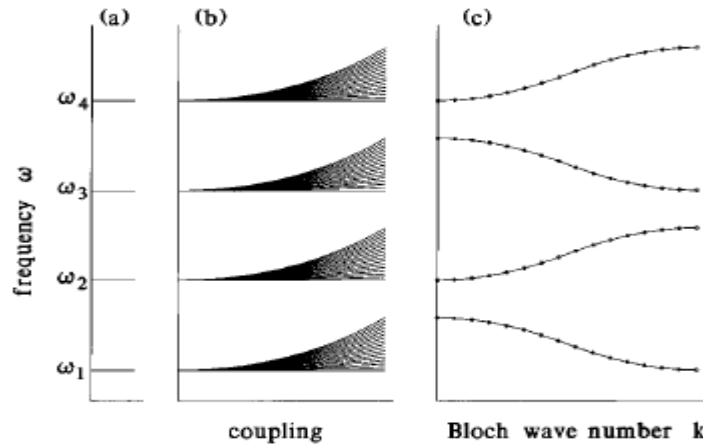


Fig. II 1 Niveaux permis discrets (correspondants aux masses infinies (a)), augmentation des paramètres de couplages entre éléments (b) et formation de la structure de bandes (c) [3,4].

Dans le cadre de la localisation d'Anderson classique, un dispositif expérimental permettant de décrire la propagation des ondes classiques transversales dans les systèmes désordonnés à été proposé par S. He et J.D. Maynard [3,4].

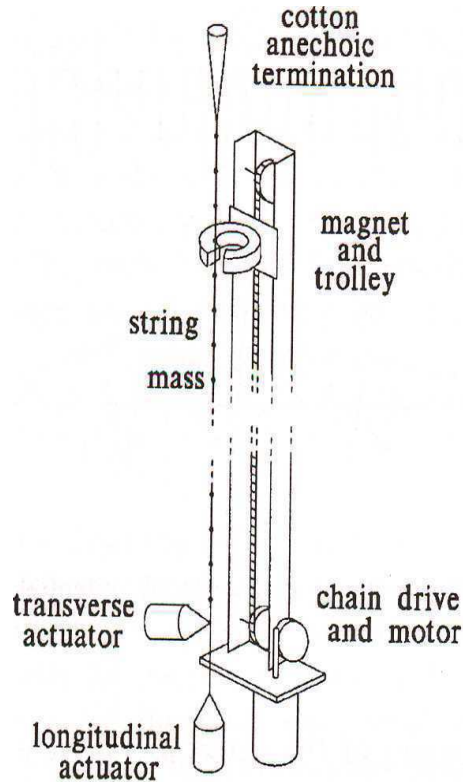


Fig. II. 2 Dispositif expérimental relatif à la localisation d'Anderson classique. Les masses ponctuelles sont disposées le long du fil métallique [3,4]

Le milieu de propagation est constitué d'un fil homogène de longueur finie, tendu uniformément et suspendu verticalement. L'onde classique transversale est générée par une source electro-vibratrice, placée sur l'une des extrémités du fil. Un ensemble de masses M disposées régulièrement sur le long du fil, définit la forme du potentiel. Considérées ponctuelles, les masses fournissent au système un potentiel sous forme d'une somme de distributions delta de Dirac. Cette réalisation expérimentale est suffisamment précise pour reproduire les phénomènes de transmission dans le modèle mécanique équivalent au modèle électronique de Kronig-Penney [6]

Le dispositif expérimental est muni d'un chariot supplémentaire transportant un aimant sous forme de C, parallèlement au fil de telle sorte que ce dernier puisse traverser l'aimant entre ces deux pôles. Lorsque la vibration transversale se propage le long du fil, le champ magnétique induit une force électromagnétique proportionnelle à la vitesse de la propagation de l'onde dans le fil, à la position de l'aimant. La mesure de l'intensité du champ

électromagnétique, nous renseigne sur le comportement de l'onde à chaque position de l'aimant le long du fil.

Dans ce dispositif expérimental, l'incertitude relative sur l'ensemble des masses rend la réalisation du système parfaitement ordonné difficile à atteindre, d'autant plus qu'il faut s'assurer de la régularité des distances entre masses d'un site à un autre. Quant au désordre, ce dernier est en général considéré de deux manières différentes : En modifiant les masses d'un site à un autre, le désordre structural (équivalent du désordre diagonal dans le modèle des liaisons fortes) est reproduit. Par ailleurs en disposant les masses sur des distances différentes les une des autres, le désordre spatial (équivalent au désordre hors diagonal dans le modèle des liaisons fortes) est ainsi construit. Dans ces conditions, la réponse du fil, soumis à une excitation transversale a été observée et représentées sur Fig. II. 3 aussi bien dans le cas d'un système presque ordonné que pour une structure spatialement désordonnée dont le taux du désordre est estimé à 2% de la période du système.

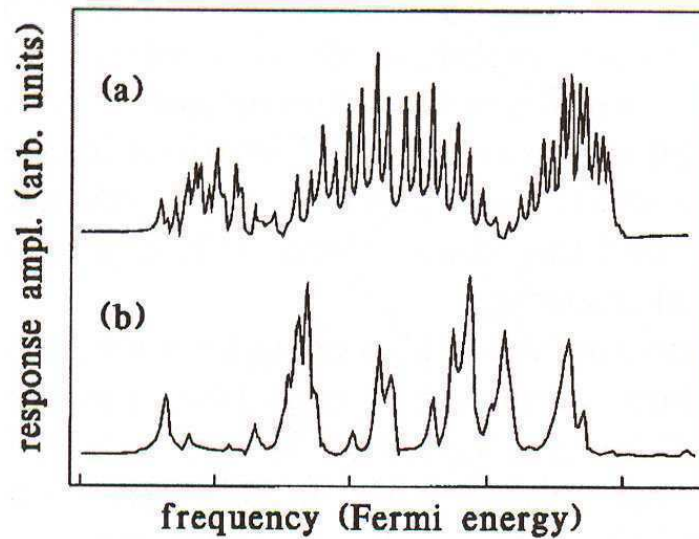


Fig. II.3 Réponses du fil à la source électro-vibratrice relatives à (a) un potentiel périodique, (b) un potentiel désordonné à 2% [3,4]

En faisant déplacer le chariot le long du fil, il devient alors possible de décrire le comportement de l'amplitude d'un mode de vibration le long de la chaîne. Plusieurs mesures sur l'amplitude de l'onde propagatrice ont été observées dans des conditions (situations) différentes du désordre. Le profil des fonctions enveloppe correspondantes aux modes de Bloch, aux modes localisés d'Anderson et aux modes de transmission mixtes est représenté sur Fig. II. 4.

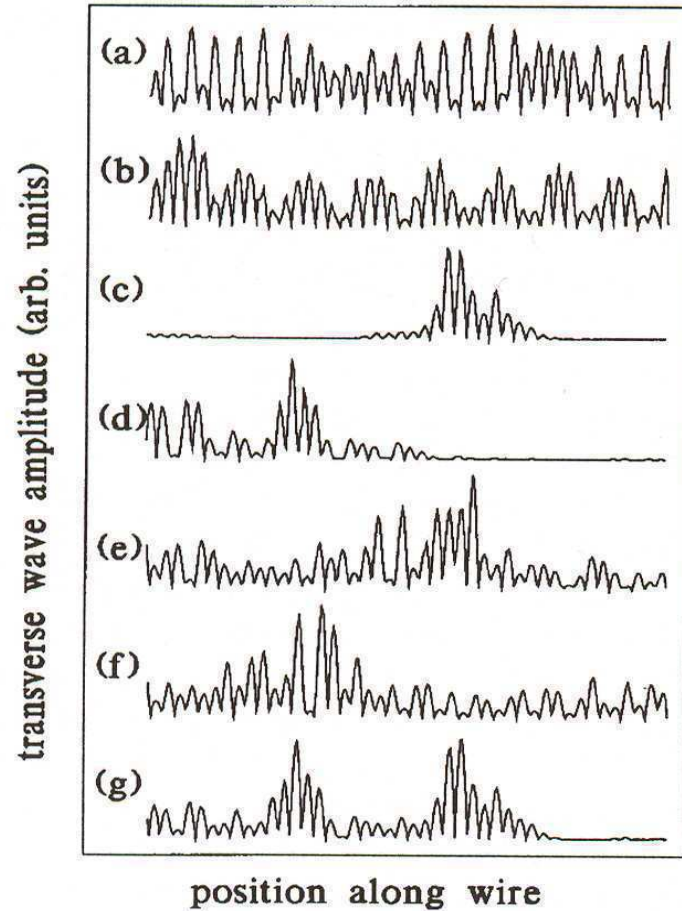


Fig. II.4 Fonctions enveloppes correspondantes à : (a) et (b) modes de Bloch, (c)-(f) modes propres du désordre à 2%, (g) état mixé par une vibration longitudinale entre les modes (c) et (d) [3,4]

Ce dispositif expérimental a été également utilisé par Maynard pour étudier d'autres phénomènes classiques équivalents à ceux de la physique mésoscopique. Les effets de la diffusion inélastiques ont été considérés en introduisant l'action d'un autre électro-vibreux qui généré une vibration longitudinale le long de fil chargé de masses. La non-linéarité conjuguée au désordre comme processus de délocalisation dans les systèmes unidimensionnels a été également examinée [7-11].

Dans le même contexte, la propagation des ondes longitudinales a été étudiée [12]. Le spectre de la transmission longitudinale et les propriétés de la conductivité thermique ont été examinés dans des systèmes mécaniques désordonnés [13]. En insérant un ressort entre deux masses successives, l'équation de la propagation des ondes élastiques devient équivalente à celle du mouvement des électrons dans le modèle électronique des liaisons fortes. Dans un système masse-ressort suffisamment désordonné, la plupart des modes

longitudinaux sont localisés. Cependant en présence de corrélations de désordre de masse, l'existence de modes délocalisés a été démontrée. Des modes étendus ont également apparu lorsque les ressorts sont introduits par paires aléatoire dans le système hôte pour lequel l'ordre de masse a été préservé [14].

Motivés par les phénomènes de délocalisation dans les systèmes électroniques unidimensionnels désordonnés, L.S. Cao et al., ont étudié récemment la transmission vibrationnelle dans les systèmes corrélés n -mers [15] : Le transport des vibrations longitudinales et son influence sur la conductivité thermique ont été examinés dans le cas des motifs dimère, trimer puis généralisé au n -mer. Les auteurs ont démontré qu'en présence de corrélation de désordre, la délocalisation induit des résonances de transmissions parfaites d'ondes acoustiques. A ces fréquences particulières, des canaux de transmission transparents sont ouverts pour le transport de l'énergie thermique. La nature des modes de transmission aux différentes résonances présente un caractère périodique à amplitude uniforme correspondant à un mode de transmission étendu similaire à une onde de Bloch. Dans la limite thermodynamique, la conductance thermique devient quantifiée.

En se basant sur ces considérations précédentes sur la localisation électronique [16-21], l'objectif de cette partie consiste à décrire les phénomènes de délocalisation des ondes transversales dans divers systèmes mécaniques à profils de potentiel différents [6,17,18]. Nous nous intéressons en particulier aux systèmes binaires classiques, pour lesquels la corrélation du désordre est à courte portée. Les réponses de la transmission, de la longueur de localisation et de la nature des modes relatifs au modèle du dimère aléatoire, sont examinées dans le cadre de l'analogie avec le modèle électronique de Kronig-Penney [6,17,18].

Aussi avec la possibilité de la manipulation sur le potentiel qu'offre le système mécanique [3-5], nous mettons en évidence l'effet de l'insertion des ressorts (en tant qu'interaction supplémentaire fournie à l'onde incidente par son milieu de propagation) sur les propriétés de transmission de la corde vibrante chargée en masses. Des améliorations considérables dans le régime de la transmission à la résonance dimère ont été obtenues [23,24]. Aussi en suivant une procédure similaire à celle de Wu et al [18] et Q. Huang et al.[22], la résolution de l'équation du mouvement classique dans le modèle de Kronig-

Penney a permis d'identifier une résonance supplémentaire dans le modèle conventionnel du dimère aléatoire

[7,17-19,22,26,27]. Ceci nous a amené par la suite à aborder l'étude des filtres acoustiques à l'effet dimère [25] dans le cadre plus attrayant de la transmission balistique [24].

La dernière section de cette partie est consacrée à l'effet dimère dans les alliages hôtes désordonnés. Le système des résonateurs masse-ressort permet de préserver la résonance dimère balistique pour autant qu'une contrainte particulière sur la distribution aléatoire des ressorts soit imposée et que la condition d'alignement des fréquences soit préservée. Le taux du désordre de masse est présenté comme un paramètre supplémentaire utile à améliorer la qualité de la transmission autour de la résonance dimère balistique de ces filtres mécaniques [24].

II. Etude des propriétés de transmission des ondes mécaniques dans les systèmes unidimensionnels

La propagation d'ondes classiques dans les milieux unidimensionnels est présentée à travers l'étude de la transmission d'ondes transversales dans des systèmes mécaniques à profils de potentiels classiques différents. Le milieu de propagation est constitué d'une corde homogène sur laquelle est disposé un ensemble de sous systèmes considérés ponctuels. Ces éléments (masse et / ou ressorts) sont reliés les uns aux autres via la corde sur laquelle est appliquée une tension uniforme [25]. En utilisant le formalisme des matrices de transfert, les réponses du système sont décrites par des relations récurrentes, similaires à celles du modèle électronique des liaisons fortes.

Dans le cas d'un ordre parfait, la formation de la structure de bande est évoquée sous différentes représentations (Fig. II.5). Deux paramètres principaux peuvent contrôler l'ordre: La périodicité spatiale du système est assurée par la distance séparatrice régulière entre deux cellules plus proches voisines tandis que l'ordre compositionnel est généré par la reproduction périodique du motif à travers tous les sites réguliers du réseau. Dans le cas de structures désordonnées, seul le désordre compositionnel est examiné dans ce travail. Nous nous intéressons au système binaire pour lequel deux motifs (hôte et défaut) sont considérés.

De la même manière que dans le chapitre précédent, l'absence de déterminisme dans les systèmes désordonnés impose une considération statistique pour les propriétés de transmission [28]: La nature localisée ou délocalisée des modes de transmission mécanique est aussi déterminée à partir des valeurs moyennes des coefficients de transmission et de la longueur réduite de localisation. La transition de phase entre modes localisés et modes délocalisés est ainsi décrite.

Dans notre travail, nous tenterons d'aboutir à un effet dimère optimisé. L'insertion des ressorts dans la corde vibrante chargée en masses, constitue l'atout majeur dans cette manipulation permettant de contrôler constructivement le désordre structural pour une meilleure maîtrise de la transmission à la résonance dimère. Dans ce contexte, les filtres mécaniques balistiques à réponses ajustables en fonction du taux du désordre de masse sont examinés.

II.1 Le système de la corde vibrante chargée en masses

Dans l'objectif de décrire convenablement la localisation d'Anderson dans les systèmes mécaniques unidimensionnels à désordre corrélé, il est important de considérer en premier lieu la limite des systèmes totalement ordonnés et ses différentes représentations. L'ordre parfait sera par la suite d'une utilité primordiale pour une meilleure compréhension du comportement des systèmes binaires désordonnés.

A- Description de l'ordre parfait

Dans l'exemple considéré, soit une corde homogène de densité linéique $\mu = 5 \text{ kg} / \text{m}$ chargée par un ensemble de masses identiques $M_n = M_0$. Chacune des N masses ($n = 1, N$) occupe la position $x_n = nd$ où $d = 0.05 \text{ m}$ est la périodicité du système. En imposant une tension $T_0 = 10 \text{ N}$ uniforme le long de la chaîne, l'onde se propage à une vitesse $v_\phi = \sqrt{\frac{T_0}{\mu}} = 1.141 \text{ m/s}$ le long de ce milieu [25,31] (Fig. II. 1)

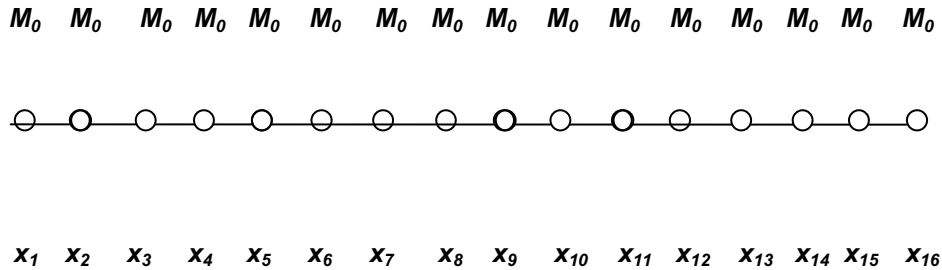


Fig. II.1 Système mécanique de la corde vibrante de masse

Soit $M_0 = 0.100 \text{ kg}$ et déterminons (en utilisant le formalisme de la matrice de transfert) le coefficient de transmission T relatif ce système ordonné. Pour une structure finie à N périodes ($N = 2, 3, 5, 10, 40 \text{ et } 100$), le nombre de pics correspondants aux différents ordres des résonances est égal à $i = N-1$ (Fig. I. 2)

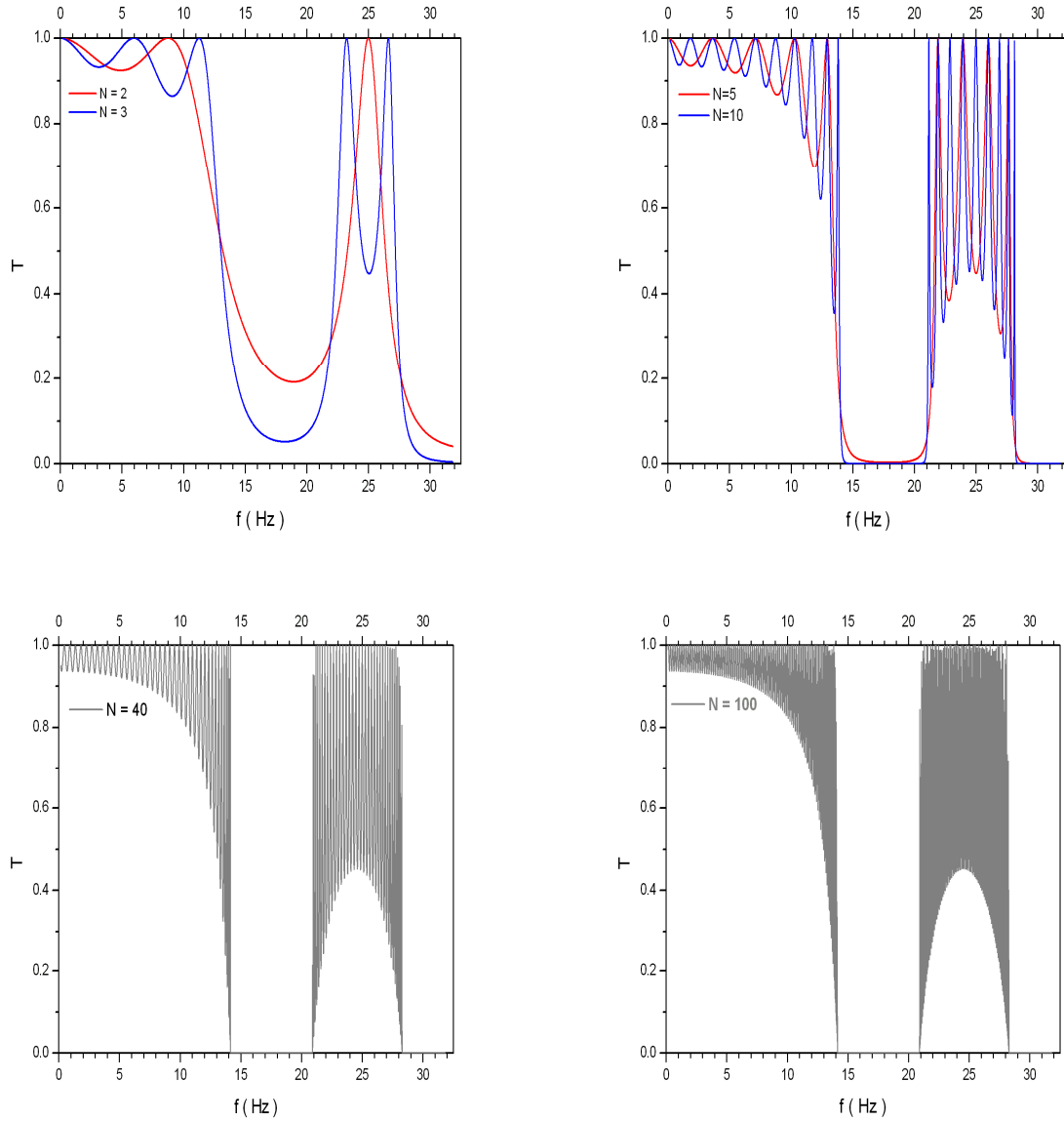


Fig. II.2 Formation de la structure de bandes dans la corde vibrante chargée en masses
($M_0 = 0.100 \text{ kg}$, $T_0 = 10 \text{ N}$ et $d = 0.05 \text{ m}$)

Lorsque la longueur du système est suffisamment grande ($N = 40, 100$ périodes), les résonances s'organisent de manière assez compactes à l'intérieur de domaines de fréquences permises ($T = 1$), séparées de domaines de fréquences interdites pour lesquelles le système devient totalement réfléchissant ($T = 0$). La transition d'une bande transparente vers une bande totalement réfléchissante se fait de manière abrupte. Ceci représente la formation en structure de bandes dans les systèmes ordonnés à partir des différents ordres de résonances.

Dans le réseau réciproque, la structure de bande peut être déduite à partir des propriétés de transmission d'une structure à une période dans le réseau direct. La relation de dispersion est totalement retranscrite dans l'espace réciproque, sur la première zone de Brouillon :

$$0 \leq \frac{qd}{\pi} \leq 1 \quad (\text{II.3})$$

Fig. II.3 montre la correspondance parfaite entre domaines de fréquences de transparence parfaite et réflexion totale avec les bandes permises et interdites. Dans un système infini totalement ordonné, seuls deux cas sont possible : L'onde est permise et traverse parfaitement le système par un canal permis ($T = I$), ou bien elle est totalement réfléchié et sa fréquence est interdite (voir Fig. II.4).

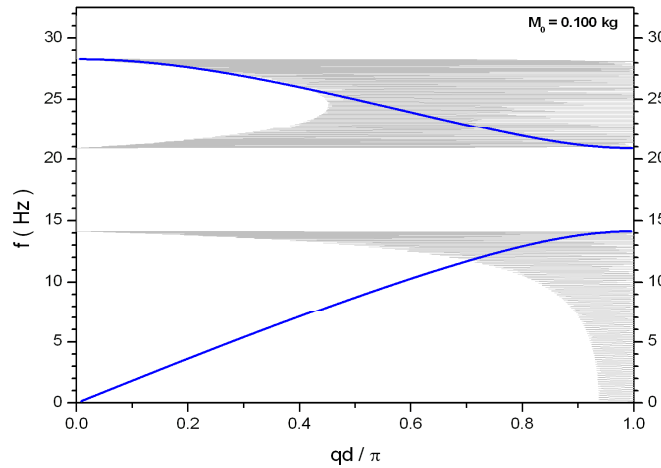


Fig. II. 3 Correspondance entre profil de transmission (en gris) et structure de bandes (en bleu)

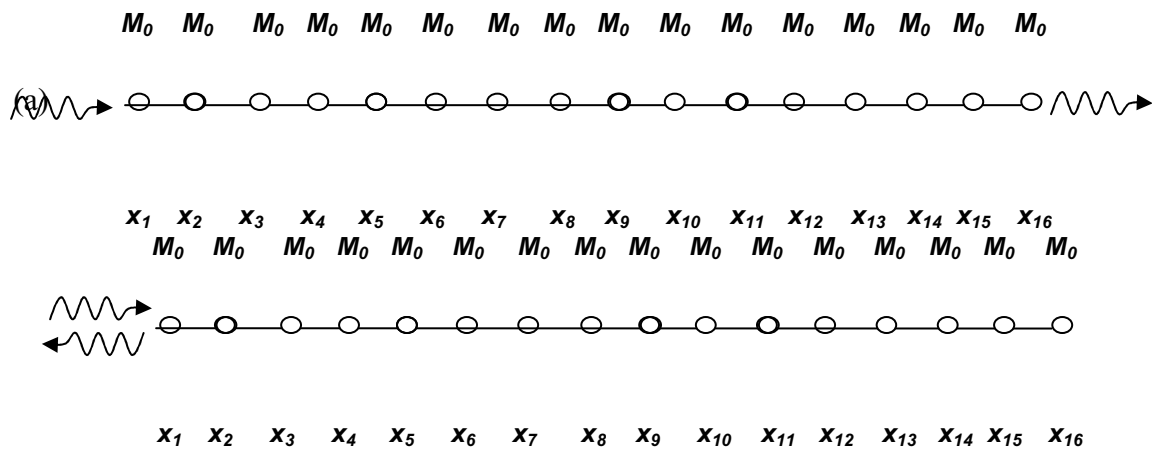


Fig. II. 4 : Schéma d'une onde permise (a) et d'une onde interdite (b) dans une chaine linéaire de masses identiques

Une autre manière de considérer la formation d'une structure de bandes $q(f)$ consiste à déduire la fonction de Kronig-Penney $\kappa(f)$ à partir du formalisme de la matrice de transfert (Appendice I.). Sur la Fig. II.5, une correspondance directe entre la structure de bandes, le profil de transmission et la fonction de Kronig-Penney sur un domaine de fréquence plus large est représentée : Au fur et à mesure que la fréquence augmente, la fonction $\kappa(f)$ qui est continue et monotone, délimite des bandes permises (interdites) de plus en plus fines (larges) à chaque fois que $|\kappa(f)| < 1$ ($|\kappa(f)| > 1$). Les bords de bandes pour lesquels la vitesse de groupe s'annule correspondent à la condition $|\kappa(f)| = 1$.

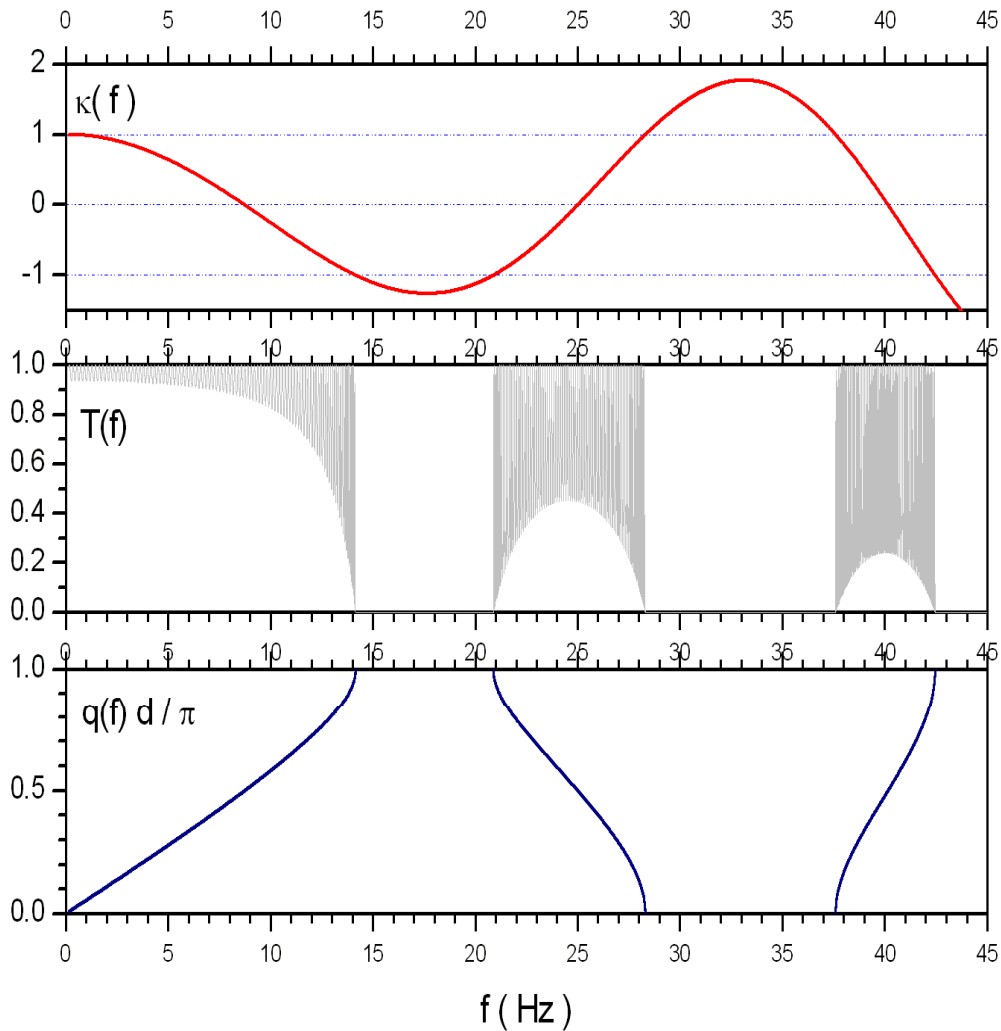


Fig. II. 5. Correspondances entre (de haut en bas) : relation de Kronig-Penney, spectre de transmission et structure de bandes pour $M_0 = 0.100$ kg et $N = 250$

Des systèmes ordonnés présentant une masse différente ont été examinés. Sur Fig. II.6, une représentation de la fonction de Kronig-Penney pour les masses $M_0 = 0.100, 0.150, 0.200$ et 0.300 kg est donnée. Etant considéré comme l'élément principal définissant l'ordre compositionnel, la masse et sa variation influe sur la structure de bandes : Avec l'augmentation du poids de l'objet suspendu, une réduction de la largeur des bandes permises est enregistrée, permettant ainsi à la bande interdite de devenir de plus en plus large. En d'autres termes, le système devient de plus en plus contraignant à faire propager les ondes pour des masses de plus en plus importantes.

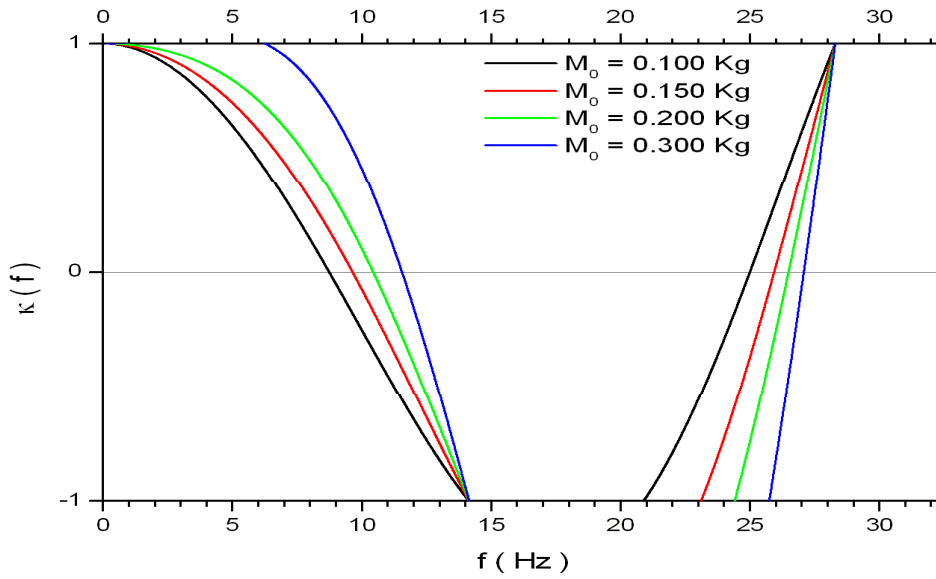


Fig. II. 6 Relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney pour différentes cellules élémentaires :
($M_0 = 0.100, 0.150, 0.200$ et 0.300 kg)

Nature des modes permis

Dans le but de déterminer la nature des modes permis, la fonction enveloppe correspondante est examinée à partir de la description du coefficient de transmission $T(N)$ en fonction de la taille du système (mesurée en nombre de périodes N). Pour différents modes situés aux bords et au centre de la bande permise fondamentale du système ($M_0 = 0.300$ kg), les ondes permises de vecteur d'onde q_n reproduisent différemment le théorème de Bloch (voir Fig. II. 7) : Les fonctions enveloppes sont périodiques à amplitudes constantes et c'est la condition de résonance

$$q_n d = \frac{n\pi}{N} \Big|_{n=1, N-1} \quad (\text{II.4})$$

qui détermine l'allure de la fonction enveloppe. Ainsi pour une périodicité d donnée du système, chaque nombre d'onde q_n reproduit 'son' ordre parfait. La condition de Bloch peut aussi être considérée différemment : Connaissant le nombre d'onde k_0 d'une onde incidente, il devient aussi possible de déduire une période d_n vérifiant une relation semblable:

$$q_0 d_n = \frac{n\pi}{N} \quad (\text{II.5})$$

pour laquelle, les transmissions et réflexions successives le long des éléments de la structure reproduisent un ordre effectif dans le milieu de propagation. Le système physiquement ordonné sur la période spatiale d devient effectivement ordonné sur l'échelle de distances d_n reproduisant de manière similaire la condition de Bloch.

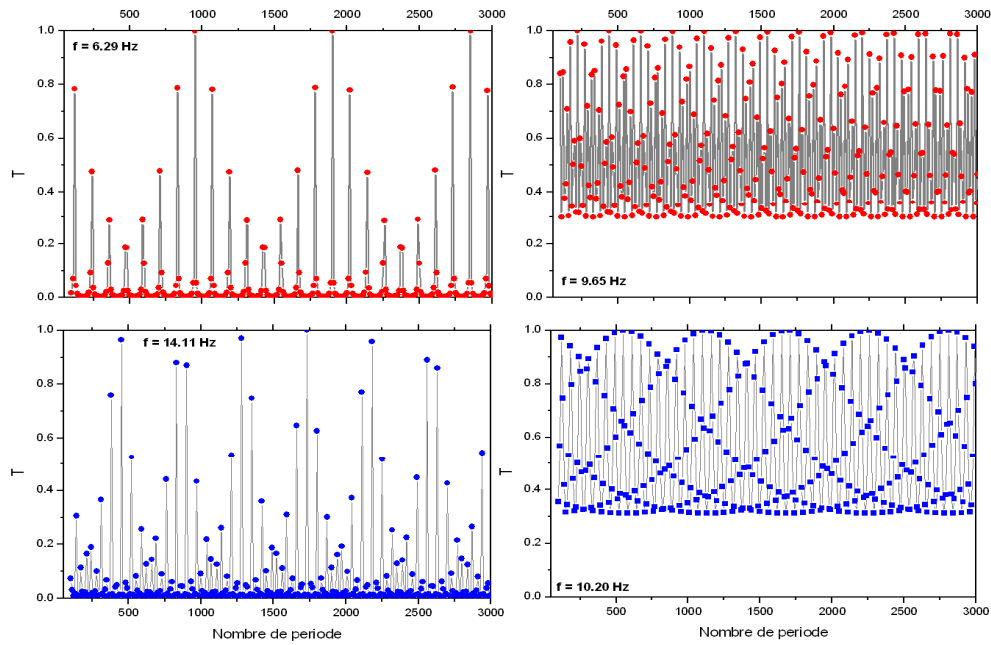


Fig. II.7 fonctions enveloppes périodiques pour différentes fréquences permises:

$$f = 6.29, 9.65, 10.20 \text{ et } 14.11 \text{ Hz lorsque } M_0 = 0.300 \text{ kg}$$

En conclusion, cette partie nous a permis de nous familiariser avec les différentes représentations relatives à l'ordre parfait dans une corde vibrante de masses. En présence de masses différentes, les systèmes ordonnés présentent des structures de bandes de largeur de bandes permises différentes. Pour chaque modes permis, la fonction enveloppe est periodique conformément au théorème de Bloch.

B- Etudes du désordre compositionnel de masse

Dans le but de décrire les effets de la localisation d'Anderson, la nature des modes de transmission dans les systèmes binaires non corrélé est examinée dans le cadre d'un désordre structural. Le taux du désordre est défini par rapport à la concentration c_B des défauts et/ou la taille du système (mesurée en nombre de séquences N). Les effets de la corrélation du désordre à courte portée sont ensuite considérés pour vérifier les prédictions conventionnelles de l'effet dimère, telles que définies dans le modèle électronique de Kronig-Penney [6]. Finalement la nature des modes de transmission autour de la résonance dimère est donnée en fonction du taux de désordre.

B-1 Cas des composés binaires non corrélés

a- Description des coefficients de transmission et de Lyapunov réduit.

Soient deux masses M_A , M_B distribuées aléatoirement sur l'ensemble des sites réguliers x_n d'une corde vibrante conformément la fonction de distribution binaire :

$$P(M_i) = c_B \delta(M_i - M_B) + c_A \delta(M_i - M_A) \quad (\text{II.6})$$

où c_B et $c_A = 1 - c_B$ représentent la concentration des éléments défauts (M_B) et hôtes (M_A) respectivement (Fig. II. 8)

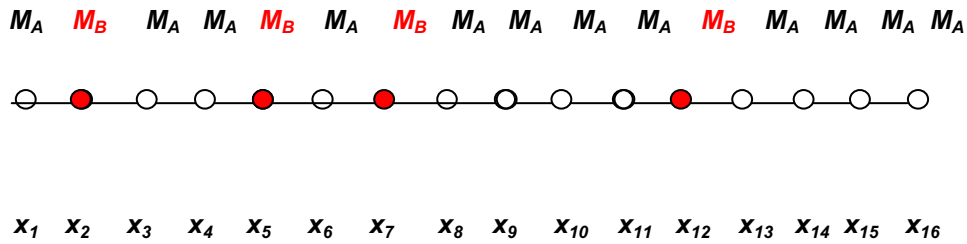


Fig. II.8 Désordre binaire non corrélé dans une corde vibrante chargée en masses

L'équation de la propagation de l'onde sur l'ensemble des sites $x_n = nd$ est donnée par :

$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} + q^2 y(x) = \sum_n \lambda_n(\omega) \delta(x - nd) y(x) \quad (\text{II.7.1})$$

où

$$q = \frac{\omega}{v_\phi} \quad \text{et} \quad v_\phi = \sqrt{\frac{T_0}{\mu}} \quad (\text{II.7.2})$$

représentent le vecteur d'onde et la célérité de celle-ci à travers tout le système. Contrairement au cas électronique (Eq.I.27), l'intensité du pic du potentiel mécanique $\lambda_n = \lambda_n(f)$ est effective :

$$\lambda_n(f) = \frac{M_n}{T_0} f^2 \quad (\text{II.8})$$

M_n représente la masse au $n^{\text{ième}}$ site et T_0 la tension uniforme appliquée à la corde [7]. Considérons l'exemple des paramètres suivants $M_A = 0.300 \text{ kg}$, $M_B = 0.150 \text{ kg}$ et $N = 500$ et déterminons à partir du formalisme de matrices de transfert les réponses moyennes de la transmission. Les valeurs du coefficient de transmission $\langle T \rangle$ et de la longueur de localisation réduite $\langle \frac{L}{\xi} \rangle$ (où ξ est la longueur de localisation et L la taille du système) sont représentées sur les Fig. II. 9(a) et (b). Des concentrations c_B allant jusqu'à $c_B = 0.40$ sont considérées.

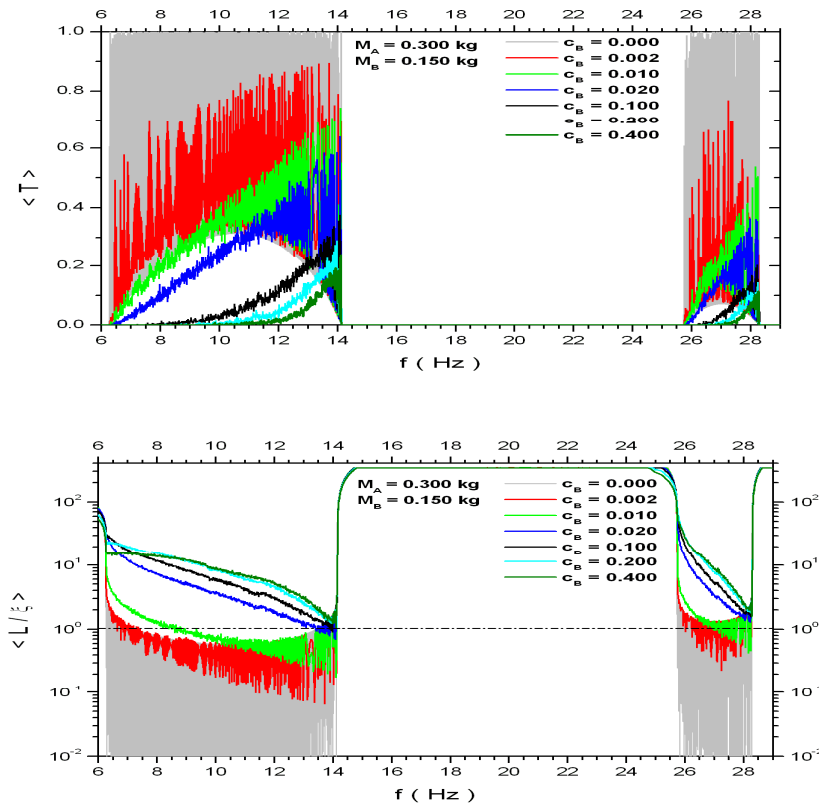


Fig. II.9 : Réponses moyennes de la transmission (en haut) et de la longueur de localisation réduites (en bas) dans le cas du désordre binaire non corrélé pour différentes concentrations c_B du défaut. Bande interdite caractérisée par $L/\xi \gg 1$

La structure de bandes du réseau hôte ($M_A = 0.300 \text{ kg}$, $c_B = 0$) est immédiatement affectée à partir de l'insertion d'un défaut ($c_B = 0.002$). Pour des concentrations de plus en plus importantes, l'effet du désordre est d'autant plus destructif que les modes de transmission sont proches des bords inférieurs des bandes permises situés à $f = 6.25 \text{ Hz}$ et $f = 25.75 \text{ Hz}$ pour les première et seconde bandes respectivement. Par contre, les modes de transmission proches des bords supérieurs des bandes permises ($f = 14.10 \text{ Hz}$ et $f = 28.40 \text{ Hz}$) résistent plus à l'effet du désordre ($\langle T \rangle \approx 0.20$ et $\langle T \rangle \approx 0.10$). Ce domaine de fréquences correspond aux modes les plus proches de l'ordre spatial du système (vérifiant la relation $qd \approx n\pi$ où n est l'indice de la bande) et par conséquent aux modes les plus susceptibles de rester délocalisés ($\langle \frac{L}{\xi} \rangle \approx 1$).

b- Description de la nature des modes de transmission

La nature des modes de transmission est identifiée à partir de la description de la réponse moyenne $\langle T(N) \rangle$ en fonction de la taille du système (mesurée en nombre de séquences N). Parmi les systèmes décrits ci-dessus (Fig. II.9), considérons les deux configurations $c_d = 0.20$ et $c_d = 0.40$ et examinons des modes de transmission appartenant à la première bande permise (Fig. II.10). Nous nous intéresserons plus particulièrement aux modes situés au bord inférieur ($f \approx 6.30 \text{ Hz}$), au bord supérieur ($f \approx 14.10 \text{ Hz}$) et au centre ($f \approx 10.40 \text{ Hz}$) de la bande permise, tels que identifiés dans l'ordre parfait (Fig. II. 9(a)).

Présentant un coefficient de transmission nul ($\langle T \rangle = 0$), l'onde incidente au bord inférieur ($f \approx 6.30 \text{ Hz}$) de la bande permise est totalement réfléchiée pour la concentration $c_B = 0.20$. Face au même taux du désordre, l'onde permise au centre de la bande ($f \approx 10.40 \text{ Hz}$) réagit différemment. Celle-ci se présente sous forme d'une onde évanescence d'une profondeur de pénétration finie $\xi \approx 270 \text{ d}$ dans ce milieu désordonné. Quant au dernier mode situé à $f \approx 14.10 \text{ Hz}$, sa propagation au bord supérieur de la bande est plus intéressante : La fonction enveloppe apparait sous un aspect mixte dans lequel se côtoient les contributions d'une fonction enveloppe périodique caractérisant les modes étendus de l'ordre parfait et une décroissance exponentielle en amplitude reproduisant le caractère contraignant du désordre d'Anderson.

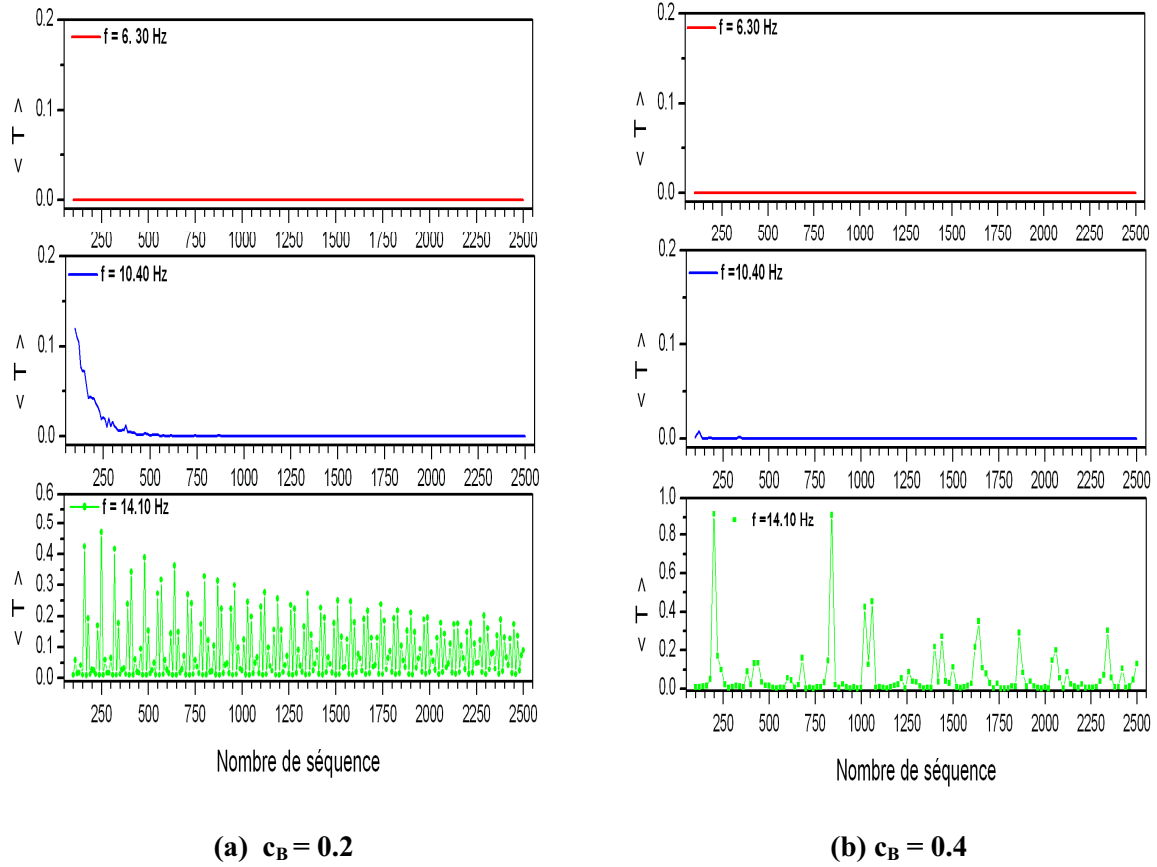


Fig. II.10 : Différents modes de transmission appartenant à la 1^{ère} bande permise ($c_B = 0.2$ et $c_B = 0.4$).
Apparition des états mixtes pour $f \approx 14.10$ Hz

Dans le cas $c_B = 0.40$, les effets de la localisation sont plus importants : le mode évanescents du centre de la bande est totalement réfléchi ($\langle T(N) \rangle = 0$), tandis qu'en bord de bande, le mode mixte ($f \approx 14.10$ Hz) est plus localement localisé bien que sa fonction enveloppe soit restée apériodique. Dans cet état mixte, c'est l'ordre topologique qui cède le poids de sa contribution périodique au dépend de l'effet dominant du désordre structural.

c- Conclusion

En absence de la symétrie de translation due au désordre, la structure de bande est immédiatement détruite. Le taux du désordre dicte le comportement des ondes dans ces milieux : Les fonctions enveloppe correspondantes au désordre binaire non corrélé sont exponentiellement décroissantes. Au voisinage des bords supérieurs des mini-bandes, des états mixtes peuvent apparaître. Ces modes les plus proches de l'ordre topologique du système ($kd = n\pi$ où n entier), sont les plus robustes face aux effets du désordre.

2. Cas des composés binaires corrélés à courte portée : effet dimère

Nous venons de constater que lorsque le désordre non corrélé est introduit dans le système binaire de masse, la localisation d'Anderson est perçue différemment dans le spectre de transmission. Considérons le défaut précédent ($M_d = 0.150 \text{ Kg}$, $d = 0.05 \text{ m}$) et à titre de comparaison, étudions l'effet dimère aléatoire de masse (lorsque le défaut masse apparaît par paires) dans le réseau hôte ($M_0 = 0.300 \text{ Kg}$, $d = 0.05 \text{ m}$).

a -Description des coefficients de transmission et de Lyapunov réduit.

La réponse moyenne de la transmission pour $c_B = 0.20$ est représenté sur Fig. II. 11. Contrairement au cas précédent du désordre non corrélé (nc) où $\langle T_{nc} \rangle$ est faible à l'intérieur d'une bande permise, un pic de transmission unité $\langle T \rangle = 1$, apparaît au voisinage de la fréquence $f = 9.64 \text{ Hz}$.

Conformément à la prédiction théorique de l'effet dimère (Eq. (I.34)), la condition conventionnelle de l'apparition de la résonance dimère est également reproduite pour ce système mécanique dont le profil de potentiel est effectif (Eq. (II.8)). La fréquence de résonance vérifie la condition :

$$\kappa_B(f_r) = \cos(q_r d) + \frac{\lambda_B(f_r)}{2q_r} \sin(q_r d) = 0 \quad (\text{II.9})$$

où $\kappa_B(f)$ est l'équation de Kronig-Penney du motif défaut.

Sachant que la matrice de passage permet de décrire l'évolution des fonctions d'onde d'un site à un autre (Appendice I.) :

$$\begin{pmatrix} y_{n+1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\kappa_n(f) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_n \\ y_{n-1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.10})$$

une paire de défauts B identiques donne à la résonance dimère f_r

$$\begin{pmatrix} y_{n+1} \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\kappa_B(f_r) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} y_{n-1} \\ y_{n-2} \end{pmatrix} = -I \begin{pmatrix} y_{n-1} \\ y_{n-2} \end{pmatrix} \quad (\text{II.11})$$

Pour rappel, la condition conventionnelle (établie à la résonance dimère) rend la matrice de passage du motif dimère égale (à un signe près) à la matrice identité I . Aussi avec les fluctuations de transmission qui apparaissent autour de la fréquence de résonance et qui sont semblables à celles déjà établies à l'intérieur d'une bande permise dans un ordre parfait, une configuration équivalente à celle d'un ordre est aussi obtenue pour ce potentiel effectif.

Les profils de transmission des configurations dimère ($\langle T_c \rangle$) et désordre binaire non corrélé ($\langle T_{nc} \rangle$) sont présentés sur Fig. II. 11. L'apparition du pic de transmission unité à la résonance dimère ($f_r = 9.64 \text{ Hz}$) est en parfait accord la transparence du motif défaut dimère ($T_{(N=2)} = 1$) et la résolution graphique de la condition conventionnelle ($\kappa_B(f_r) = 0$).

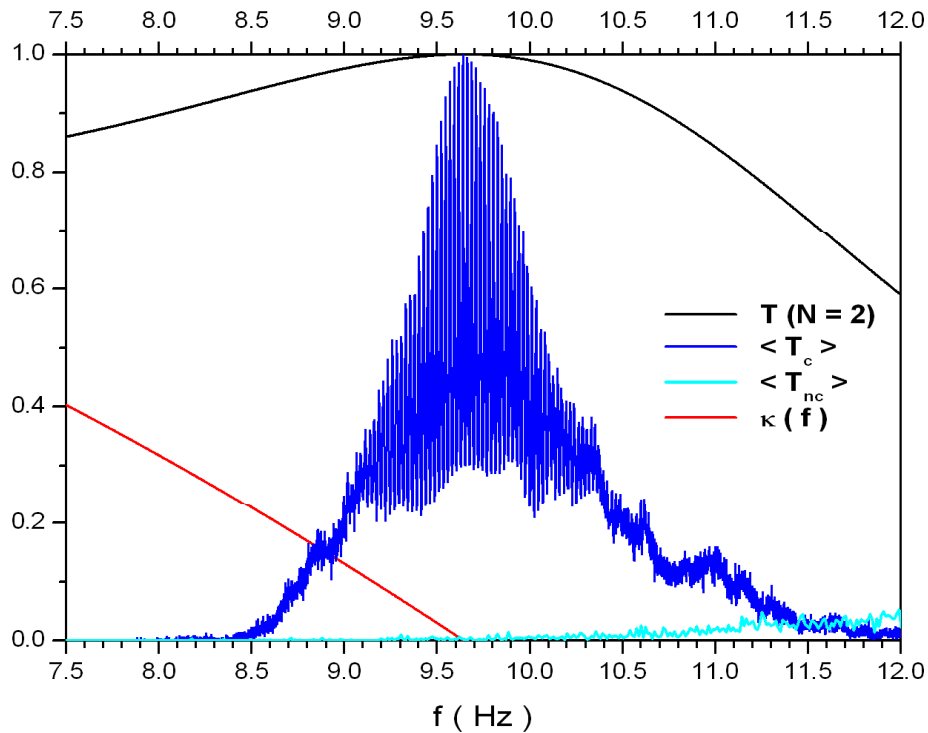


Fig. II. 11 Comparaison entre réponses des désordres binaires corrélés $\langle T_c \rangle$ et non corrélé $\langle T_{nc} \rangle$
 Accord de la résonance dimère avec le profil de transmission du motif dimère ($T_{(N=2)}$) et la
 résolution graphique de la condition dimère conventionnelle $\kappa_B(f_r) = 0$.

Les effets de la concentration des défauts sont aussi examinés pour deux concentrations différentes ($c_B = 0.20$ et $c_B = 0.40$). Etant déterminée seulement à partir de la condition de transparence du motif dimère (l'équation de Kronig-Penney), la fréquence de résonance est indépendante du nombre de défauts. Par ailleurs, conformément au cas précédent du désordre binaire non corrélé, la présence d'un nombre croissant de défauts rend la transmission plus difficile au-delà de la fréquence de résonance. Ceci explique l'étroitesse du pic de transmission pour des concentrations plus importantes.

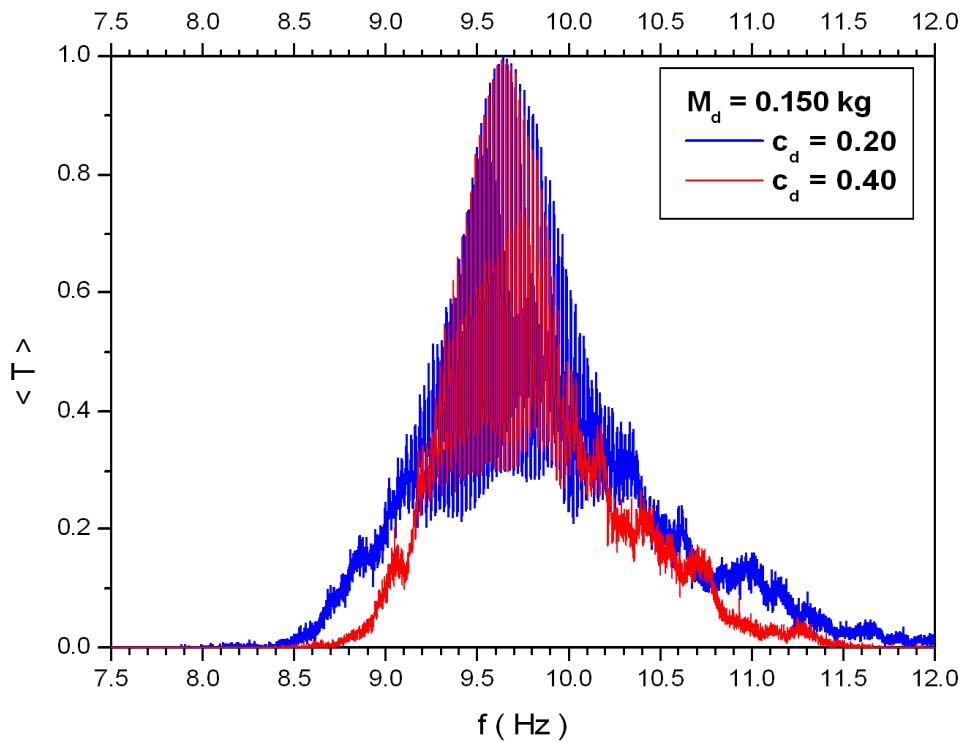


Fig. II.12 Comparaison de la transmission pour $c_B = 0.20$ et $c_B = 0.40$

D'autre part, la représentation du comportement de la longueur de localisation réduite montre l'effet néfaste de la corrélation du désordre sur ce système mécanique. Constatant que les modes apparus dans le cas non corrélé sont localisés sur l'ensemble du domaine des fréquences étudiées, ($3.0 < \frac{L}{\xi} < 17.8$ et $4.5 < \frac{L}{\xi} < 17.9$ pour $c_B = 0.20$ et $c_B = 0.40$ respectivement), l'insertion des cellules dimère délocalise considérablement le mode de propagation résonant jusqu'à l'obtention de singularités prononcées.

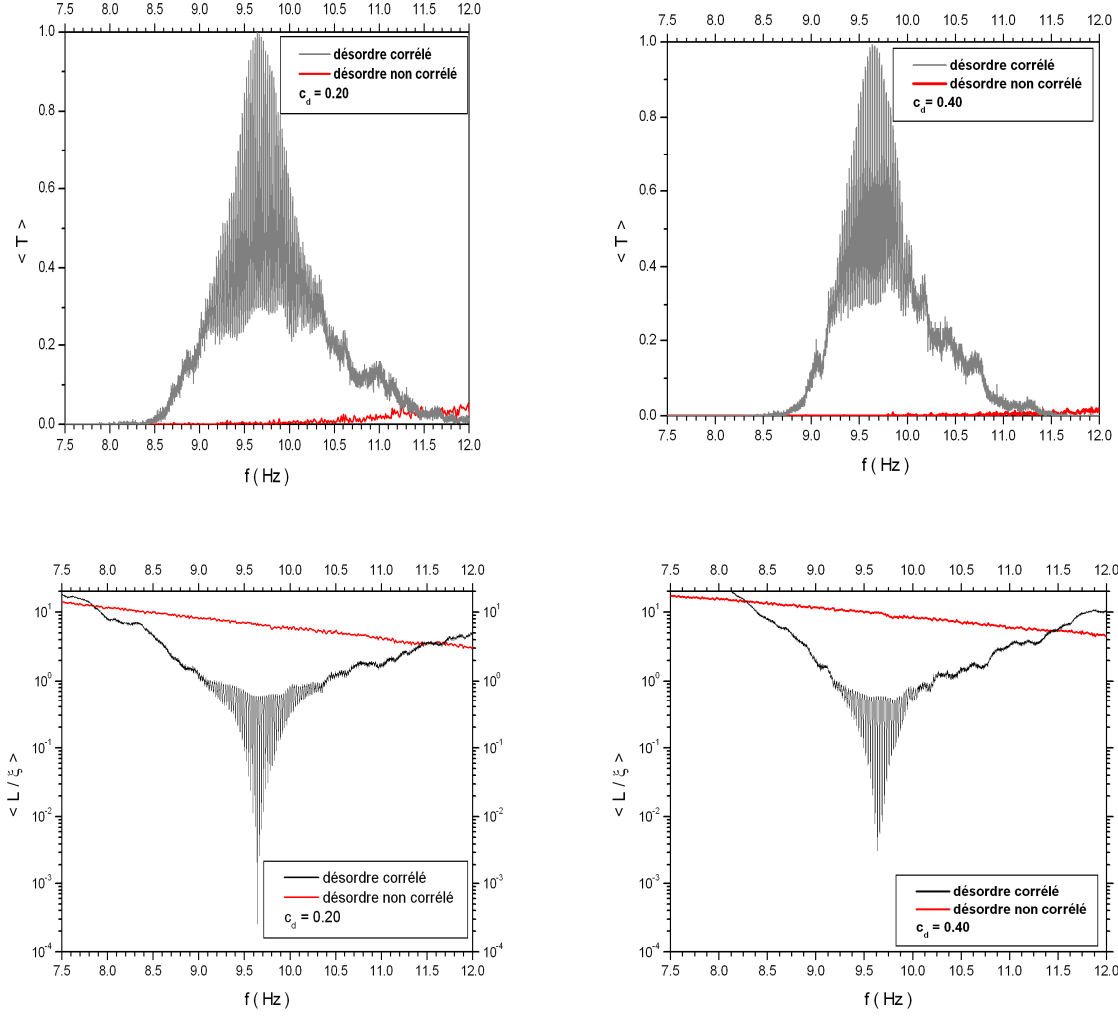


Fig. II.12 Comparaison entre les réponses de la transmission et la longueur de localisation réduite des désordres binaires corrélé et non corrélé, relatifs à $c_B = 0.20$ et $c_B = 0.40$

Des modes de transmission étendus sont ainsi fournis au système. Un ordre de grandeur sur l'amélioration des valeurs des coefficients de Lyapunov réduits à la résonance est présenté :

$$\left. \frac{L}{\xi} \right|_{\text{corrélé}} = 3.7 \cdot 10^{-5} \left. \frac{L}{\xi} \right|_{\text{non-corrélé}} \quad \text{et} \quad \left. \frac{L}{\xi} \right|_{\text{corrélé}} = 3.2 \cdot 10^{-4} \left. \frac{L}{\xi} \right|_{\text{non-corrélé}} \quad (\text{II.12})$$

Ceci équivaut à

$$\xi_{\text{corrélé}}|_{c_d=0.2} = 2.7 \cdot 10^4 \xi_{\text{non-corrélé}}|_{c_d=0.2} \quad (\text{II.13.a})$$

et

$$\xi_{\text{corrélé}}|_{c_d=0.4} = 3.1 \cdot 10^3 \xi_{\text{non-corrélé}}|_{c_d=0.4} \quad (\text{II.13.b})$$

pour $c_B = 0.20$ et $c_B = 0.40$ respectivement.

b- Description de la nature des modes de transmission

Vu les améliorations (montrées ci dessus) que présente l'effet dimère sur les réponses de la transmission et de la longueur de localisation, décrivons la nature des modes de transmission correspondant à ce profil de potentiel. Conformément à la procédure précédente, plusieurs modes de transmission sont examinés depuis la fréquence de résonance $f_r = 9.64\text{Hz}$, au le bord inférieur de la mini-bande correspondante: $f = 9.60, 9.50, 9.25, 9.00$ et 8.50 Hz respectivement. La concentration des défauts étant fixée à $c_B = 0.20$.

A la résonance dimère ($f_r = 9.64\text{ Hz}$), la fonction enveloppe se présente sous une forme périodique à amplitude uniforme, similaire (mais pas identique) à celle du mode correspondant dans le système totalement ordonné (Fig. II. 13)

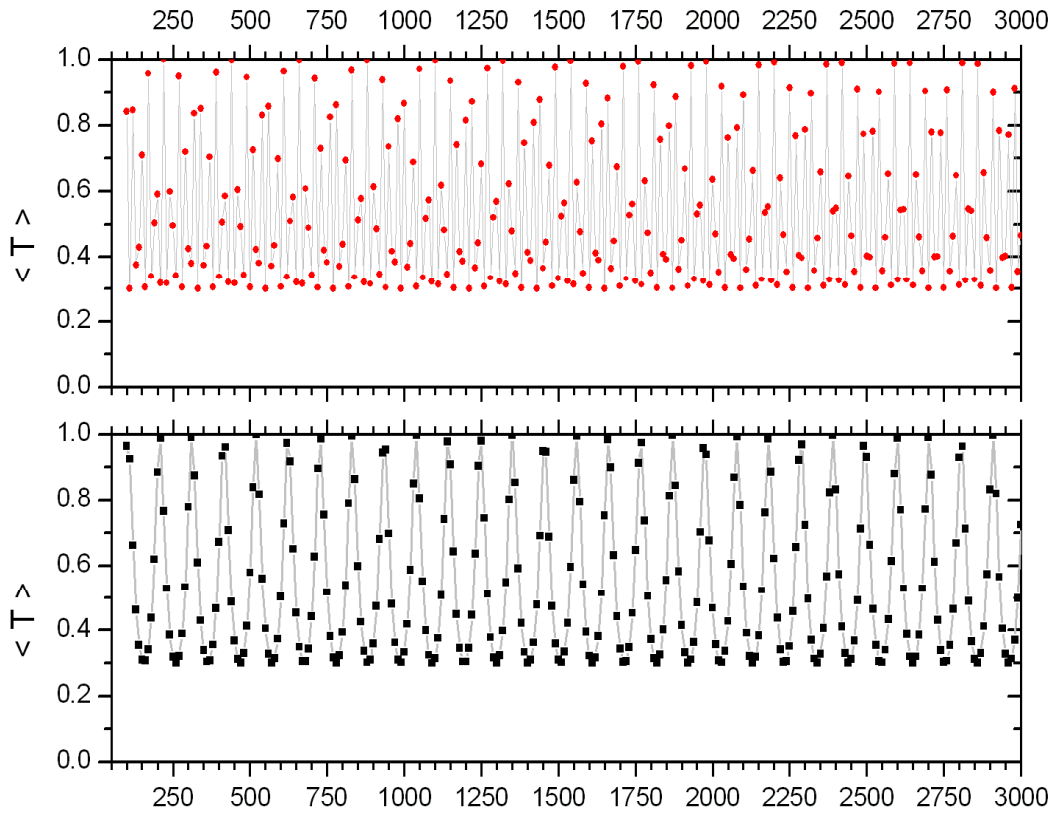


Fig. II. 13 Comparaison entre les mode de transmission étendu à la fréquence de résonance dimère $f = 9.64\text{ Hz}$ dans les configurations de l'ordre parfait (en haut) et du désordre binaire corrélé (en bas) ($c_B = 0.20$)

La transparence du défaut paire à cette fréquence caractéristique, élimine la présence du désordre structural et réorganise le milieu désordonné de propagation sous un aspect pseudo-périodique, dont la signature effective est reprise par la fonction enveloppe. En conséquence, le milieu de propagation redevient effectivement ordonné en absence de défauts (ou plutôt en présence de défauts totalement transparents) (Fig. II. 13)

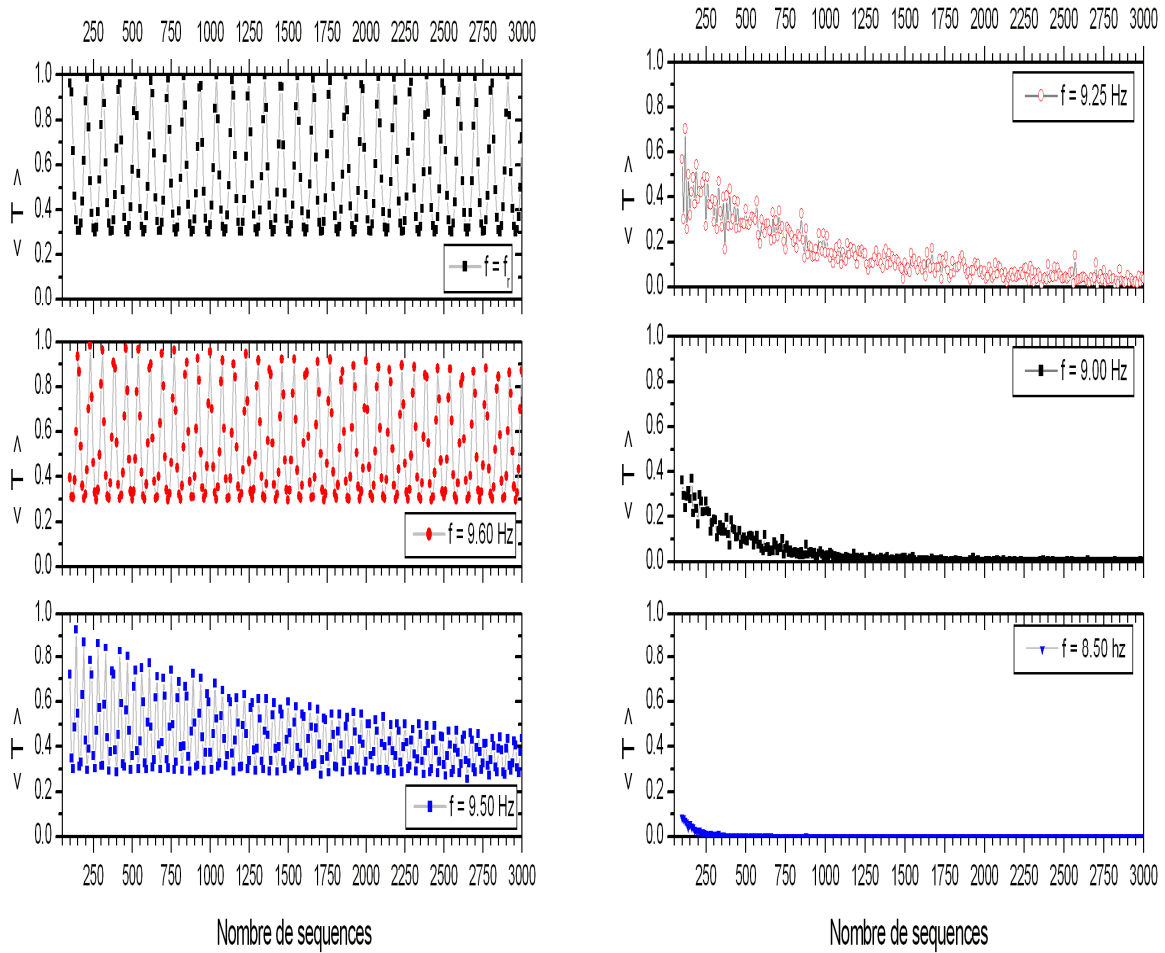


Fig. II. 14. Nature de modes de transmission appartenant à la mini-bande permise

En s'éloignant de la résonance dimère ($f = 9.60$ Hz), l'effet du désordre commence à apparaître. La fonction enveloppe préserve son caractère périodique mais perd faiblement de l'uniformité de son amplitude au fur et à mesure que l'onde se propage dans des systèmes de plus en plus longs. Avec une perte insignifiante de cohérence de phase, ce mode de transmission jouit encore de bonnes conditions pour préserver sa composante étendue sur des échelles de longueurs importantes ($N = 3000$).

Par contre, l'effet du désordre est sensiblement apparent à la fréquence $f = 9.50 \text{ Hz}$. La décroissance exponentiellement significative de l'amplitude est un signe de la présence de la localisation d'Anderson. A titre d'exemple, l'onde incidente perd 60 % de son intensité initiale lorsqu'elle atteint le milieu d'émergence en $x_N = 3000 d$, tout en préservant encore son caractère étendu.

Quant aux cas des autres fréquences, de plus en plus proches du bord inférieur de la mini-bande permise, la fonction enveloppe de ces modes mixtes est plutôt à caractère localisé. Sur des longueurs importantes, la périodicité de la fonction enveloppe disparaît. Le système devient fortement réfléchissant (opaque) avec une transmission quasi nulle ($\langle T \rangle \rightarrow 0$) à partir de $N = 1500$ et $N = 250$ pour $f = 9.00 \text{ Hz}$ et $f = 8.50 \text{ Hz}$ respectivement (Fig. II.14).

c-Conclusion

Par analogie avec le système électronique doté de la distribution delta, la présence de paires de défauts aléatoires, totalement transparentes dans un réseau hôte fournit aussi au système mécanique de la corde vibrante chargée en masses une mini-bande de modes de transmission totalement étendus. Cette mini-bande traduit une transition de phase entre modes localisés d'Anderson ($\langle T \rangle \rightarrow 0$) et modes étendus similaires à ceux de Bloch dans un ordre parfait ($\langle T \rangle \rightarrow 1$). Les modes intermédiaires ($0 < \langle T \rangle < 1$) sont des modes mixtes pour lesquels une compétition entre la contribution périodique des ondes similaires de Bloch et la décroissance exponentielle de l'amplitude des modes localisés d'Anderson existe. Le caractère de l'état mixte est essentiellement dicté par la réaction de l'onde propagatrice de fréquence permise f devant la configuration du système dont le taux du désordre est défini par la longueur du système désordonné (N) et la concentration des défauts (c_B). (Consulter tableau II.1)

II.2 le système de la corde vibrante chargée en résonateurs masses-ressorts

Dans cette partie, nous considérons l'introduction transversale de ressort sur chaque site x_n de la corde vibrante chargée en masses (Fig. II. 15). En tenant compte de cet élément supplémentaire, une nouvelle cellule élémentaire d'un oscillateur masse-ressort est ainsi obtenue.

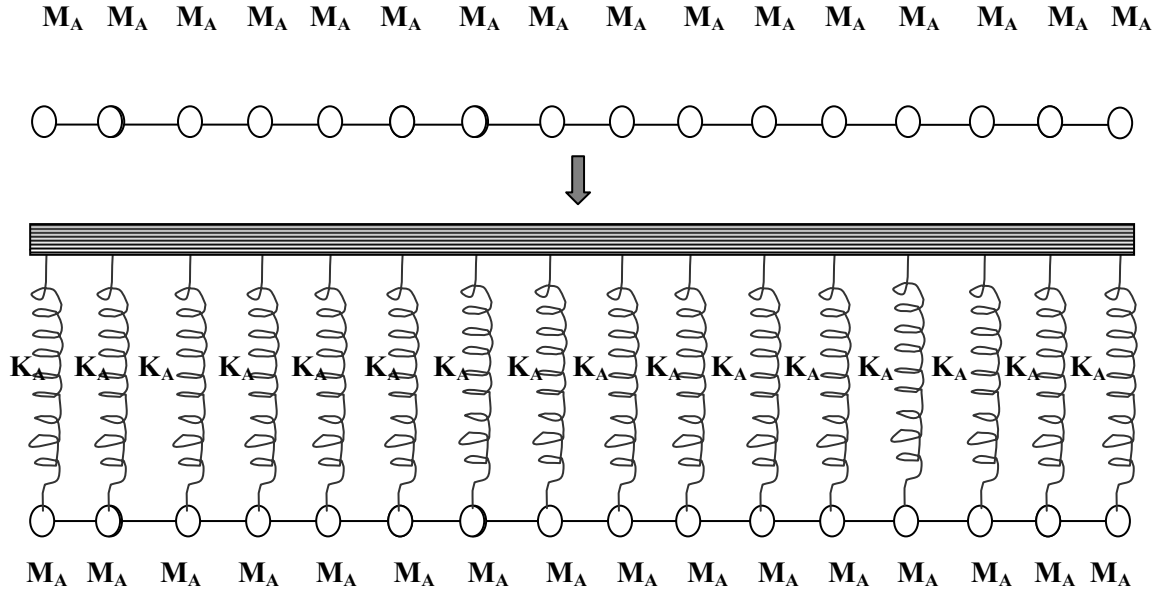


Fig. II.15 Une corde vibrante de sous-systèmes masses-ressorts ordonnés

De par la présence des ressorts, le système de masse se retrouve livré à une interaction additionnelle donnant lieu à un nouveau potentiel effectif. Le ressort servira de moyen supplémentaire pour contrôler les caractéristiques structurales de chaque cellule dans toute manipulation intentionnelle du potentiel mécanique.

L'objectif de cette partie consiste à décrire les effets du désordre structural (masse et / ou ressort) sur ce type de système. Conformément à l'étude précédente, la même démarche sera reconduite : Les systèmes ordonnés nous serviront de référence pour l'étude des systèmes binaires désordonnés (avec et sans corrélation de désordre à courte portée.). Avec la modification du motif de la structure, nous projetons de décrire la nature des résonances susceptibles d'apparaître dans le spectre de transmission des systèmes masse-ressort. En introduisant une procédure d'alignement des résonances caractéristiques, nous décrirons –

grâce à cette nouvelle approche - divers procédés de manipulation du potentiel mécanique pouvant améliorer la qualité de transmission des résonances dimère conventionnelles. Dans ce contexte, une étude comparative avec les propriétés de transmission des filtres mécaniques (masse-ressort) à effet dimère est examinée à la fin de ce chapitre [25].

A-Description de l'ordre parfait

Soit une cellule élémentaire d'un système masse-ressort dont la masse et la constante de raideur sont définies par M_A et K_A . La cellule est dupliquée périodiquement à travers les positions des sites $x_n = n d$. Nous nous intéressons au déplacement transversal $y(x)$ à la position longitudinale x_n [29,30]. L'équation du mouvement (Eq. II. 7) est donnée par un potentiel effectif $\lambda_n = \lambda_A(\omega)$ obéissant à la fonction de Dirac. Comparativement au cas précédent de motif masse (Eq. II.8), celle – ci est exprimée par une relation différente [7] :

$$\lambda_A(\omega) = \frac{1}{T_0} (K_A - M_A \omega^2) \quad (\text{II. 14})$$

traduisant la dépendance supplémentaire explicite avec la constante de raideur K_A du ressort. Ce potentiel effectif est différent de celui des deux systèmes précédents : Au terme uniforme ($\frac{K_A}{T_0}$) similaire à celui déjà étudié dans les systèmes électroniques [6] se superpose (à un signe près) le potentiel quadratique de la corde vibrante chargée en masses, étudié précédemment. D'autre part, étant donné que chaque élément masse-ressort représente un oscillateur linéaire, il devient instinctif de caractériser chaque cellule par la fréquence libre correspondante :

$$f_A = \sqrt{\frac{K_A}{M_A}} \quad (\text{II.15})$$

et d'exprimer l'intensité des pics $\lambda_n = \lambda_n(f)$ par :

$$\lambda_n(f) = \frac{K_A}{T_0} \left(1 - \frac{f^2}{f_A^2} \right) \quad \text{ou bien} \quad \lambda_n(f) = 4\pi^2 \frac{M_A}{T_0} (f_A^2 - f^2) \quad (\text{II.16})$$

en fonction de K_A (ou M_A) et de la fréquence libre f_A .

Dans ces conditions, considérons le système $M_A = 0.300 \text{ kg}$ et $f_A = 9.647 \text{ Hz}$ de période spatiale $d = 0.05 \text{ m}$ et construisons progressivement la structure ordonnée en disposant successivement $N = 2, 3, 5, 10, 40$ et 100 éléments sur la corde vibrante.

L'arrangement progressif des pics de résonances dans un domaine de fréquence conduit à l'apparition d'une bande permise conformément au principe de formation de la structure de bandes (Fig. II. 16).

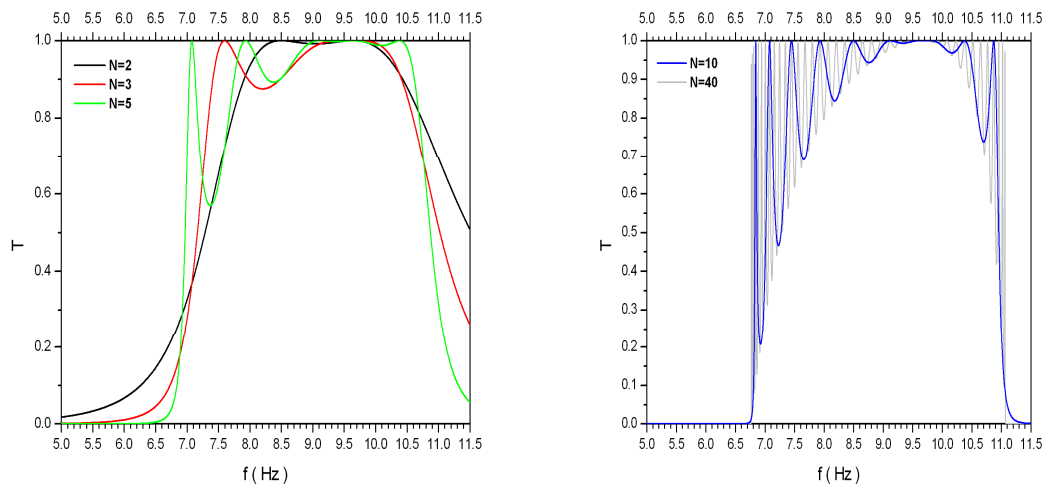


Fig. II.16 (a) Apparition des pics de résonances pour des structures à $N = 2, 3, 5, 10, 40$ cellules

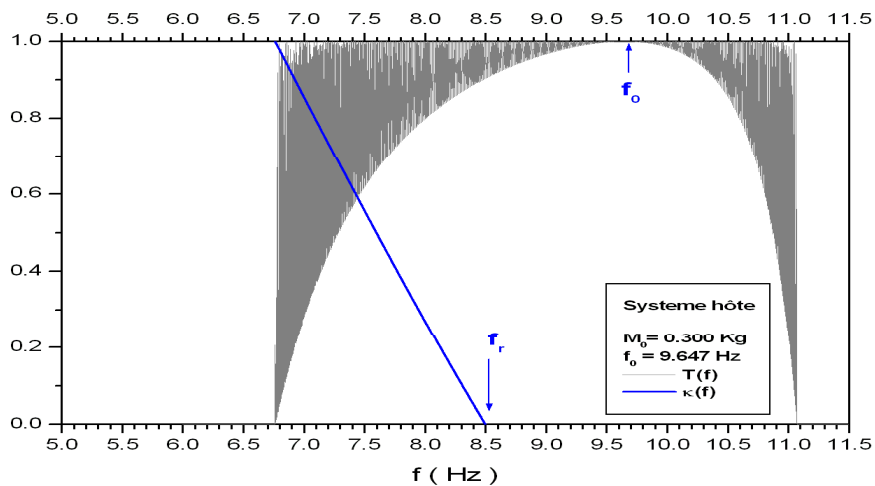


Fig. II.16 (b). La formation de la première bande permise pour le système masse-ressort.

F_0 et f_r sont les fréquences libre et dimère relatives au motif considéré

Cependant, contrairement aux cas précédents, ces résonances (au nombre $N-1$) se disposent de manière asymétrique dans la structure de bande autour d'une résonance supplémentaire se situant à fréquence libre $f_A = 9.647 \text{ Hz}$ pour laquelle les fluctuations de la transmission (qui sont relatives à la diffusion élastique dans l'ordre parfait) sont quasiment inexistantes .

Sur les deux premières bandes permises (Fig. II. 17), il est à remarquer que les profils de transmission sont qualitativement différents en fonction de l'appartenance ou pas de la fréquence libre du motif à la bande permise correspondante. Par conséquent, il deviendra aussi utile de caractériser chaque cellule masse-ressort par la fréquence libre f_A en plus de la fréquence de résonance dimère f_{rA} (vérifiant la condition $\kappa_A(f_{rA}) = 0$).

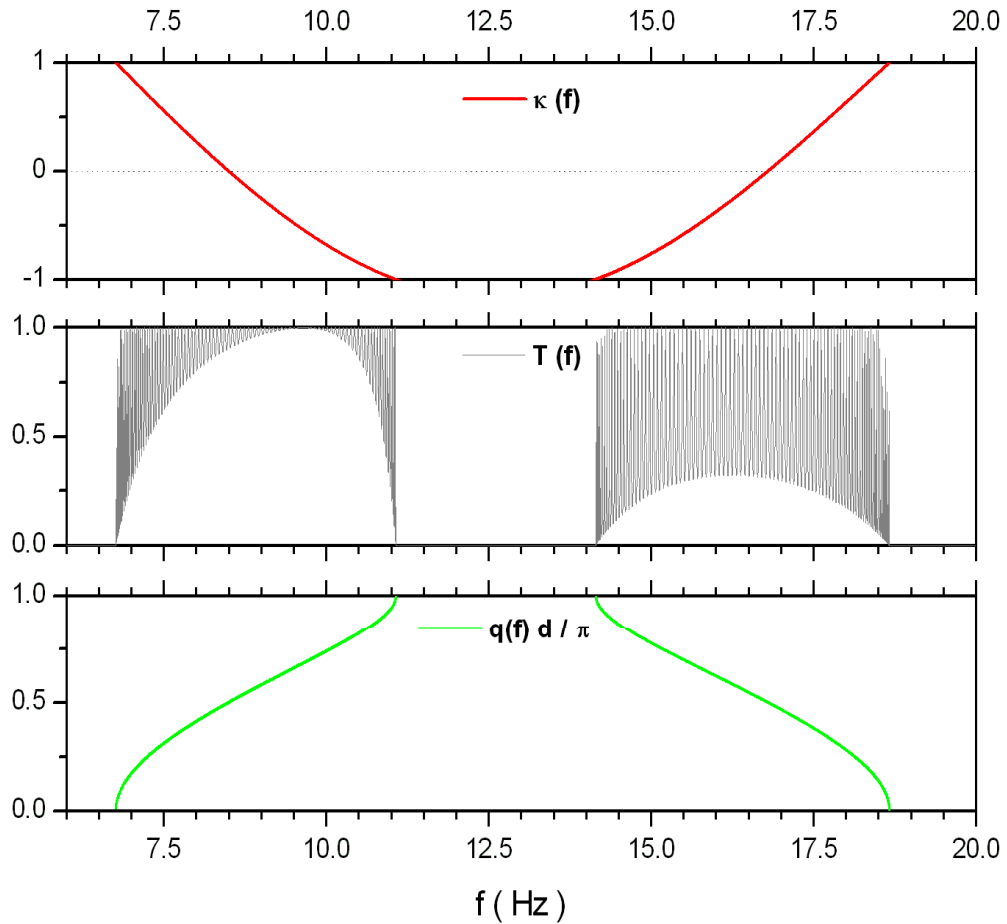


Fig. II.17. Accords entre le modèle de Kronig-Penney, le profil de transmission et la relation de dispersion de la structure de bandes dans le système masse-ressort.

Conformément à la formation des structures de bandes, le profil de transmission des systèmes masse-ressort coïncide aussi avec la structure de bandes et la relation de Kronig-Penney. Le spectre de transmission des bandes permises et interdites est délimité à partir des relations $|\kappa(f)| < 1$ et $|\kappa(f)| > 1$ respectivement.

Sur Fig. II. 17, seul le profil de transmission ($T(f)$) donne un signe distinctif à la fréquence libre.

B-Etude des systèmes binaires désordonnés

Soient deux cellules masses-ressort A, B dont les paramètres sont $M_A = 0.300 \text{ kg}$, $f_A = 9.647 \text{ Hz}$ et $M_B = 0.150 \text{ kg}$, $f_B = 8.758 \text{ Hz}$. Le profil de transmission et la fonction caractéristique du modèle de Kronig-Penney de chaque système ordonné sont représentés sur Fig. II.18

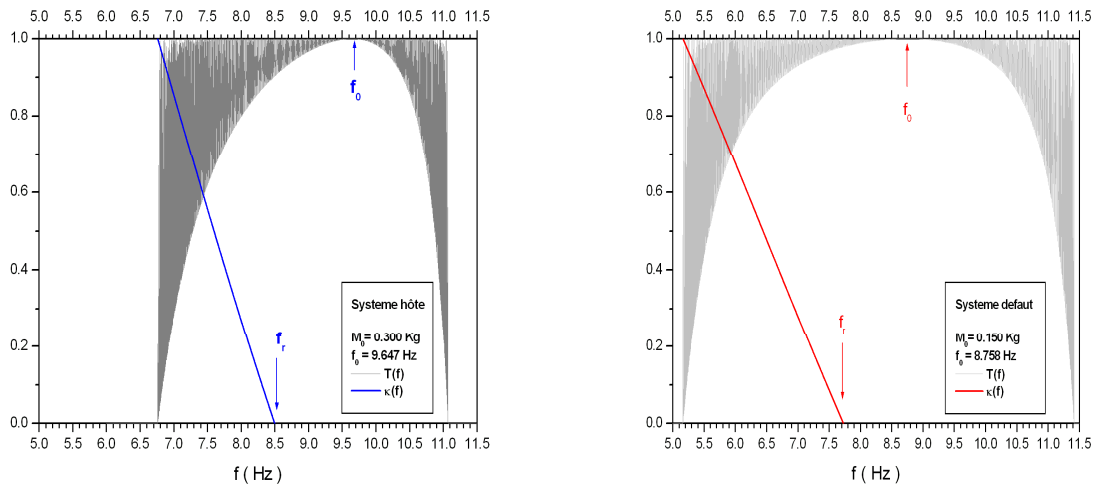


Fig. II.18. Les bandes permises des deux structures ordonnées considérées

La bande permise relative à $M_0 = 0.150 \text{ kg}$ est plus large. Pour chaque motif A (B), la fréquence libre f_A , (f_B) et la fréquence caractéristique f_{rA} , (f_{rB}) correspondantes y sont clairement indiquées.

Soit A l'élément hôte et distribuons le défaut B par paires aléatoires pour décrire les propriétés de transmission dans le modèle du dimère aléatoire. La taille du système est $L = 500 d$, la période $d = 0.05 \text{ m}$ et la concentration des défauts $c_B = 0.20$.

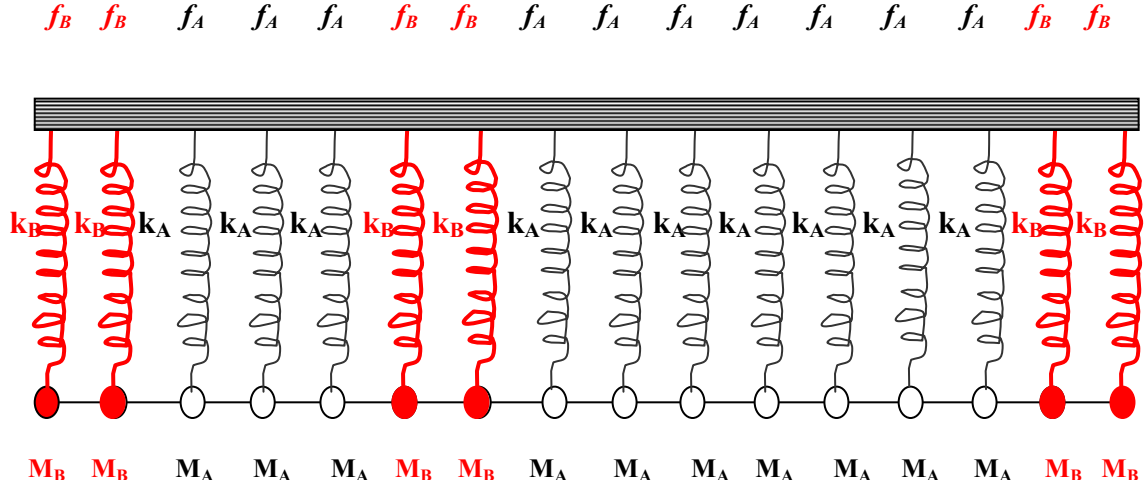


Fig 19. Représentation schématique du dimère masse-ressort dans le système de la corde vibrante

Contrairement aux cas précédents du système électronique (Fig. I.8(a)) et du système mécanique de masse (Fig. II.12.), deux mini-bandes de modes étendus apparaissent à des fréquences différentes sur le spectre de transmission (voir courbes en rouge sur les Fig. II.19 (a) et (b)).

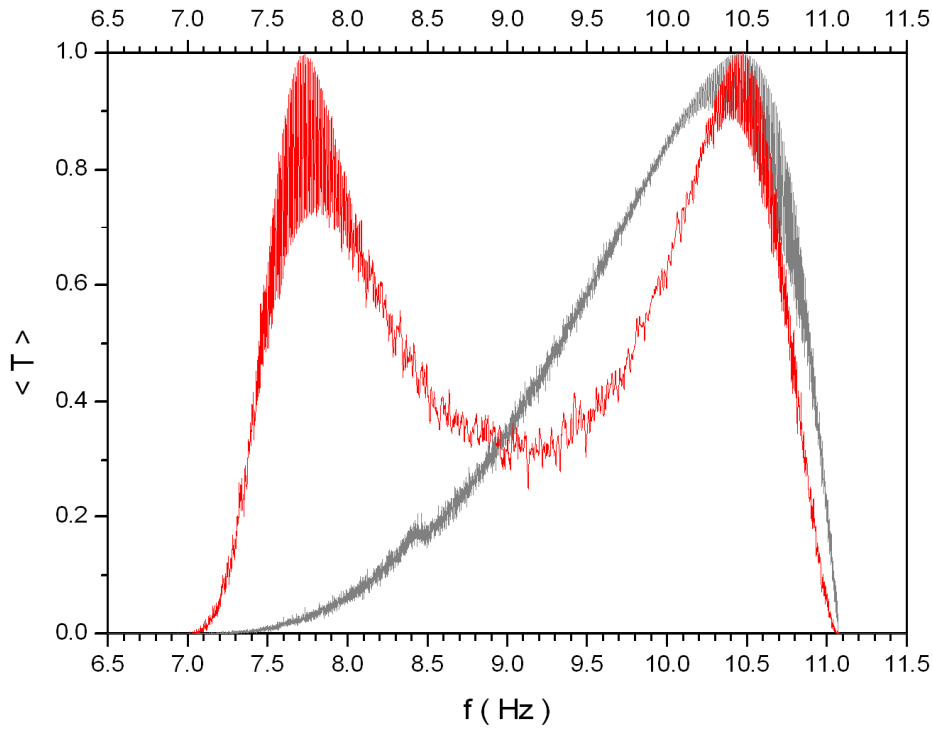


Fig.II.19 (a) Apparition des 2 pics de résonances dans le cas du désordre binaire corrélé (rouge) et d'un seul pic dans le cas du désordre non corrélé (gris)

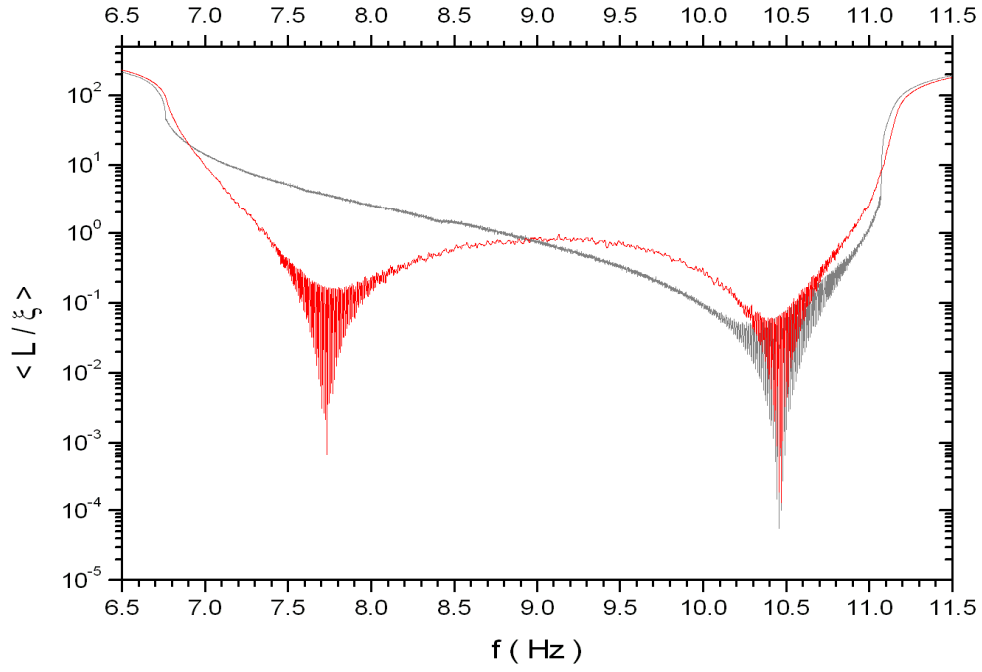


Fig.II.19 (b) Apparition des 2 singularités dans les profils du coefficient de Lyapunov réduit dans le cas du désordre binaire corrélé (rouge) et d'une seule dans le cas du désordre non corrélé (gris)

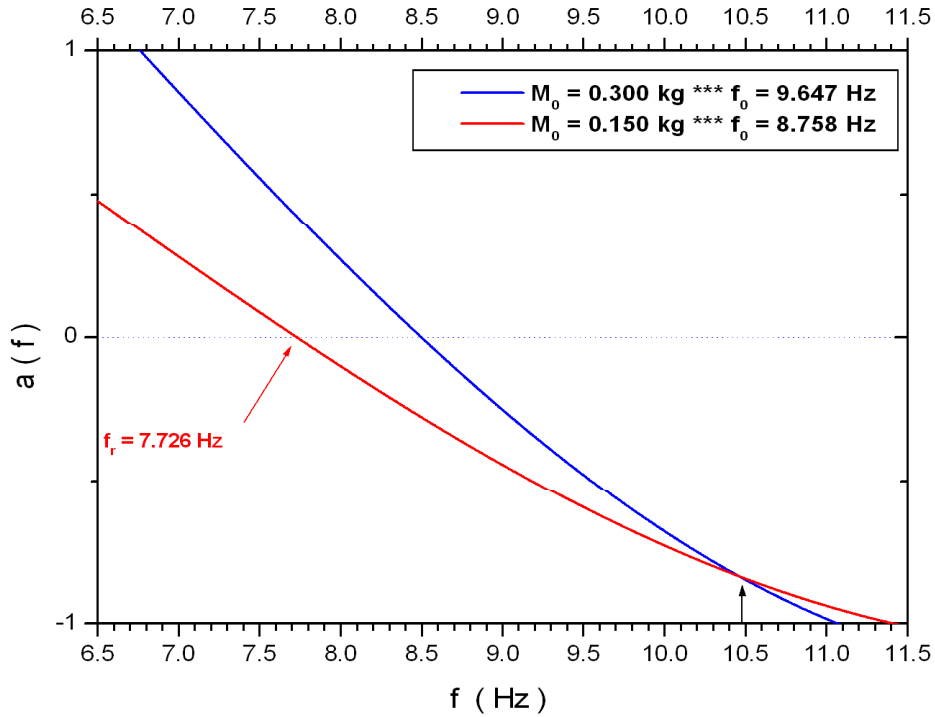


Fig. II.19 (c) Identification du type des résonances à partir des relations de dispersion du modèle de Kronig-Penney.

En consultant de plus près le comportement de la relation de dispersion (Fig. II.19(c)), nous pouvons identifier la résonance dimère f_d à la fréquence $f = f_{r1} \approx 7.73 \text{ Hz}$ conformément à la condition de résonance dimère conventionnelle (Eq.II.9). Un mode étendu ($\langle \frac{L}{\xi(f_d)} \rangle \approx 5.0 \cdot 10^{-3}$) est ainsi obtenu. Cependant, tout en ne répondant pas au critère de la transparence du motif défaut dimère, la seconde résonance située à $f_{r2} \approx 10.47 \text{ Hz}$, présente un mode de transmission aussi délocalisé ($\langle \frac{L}{\xi(f_{r2})} \rangle \approx 10^{-3}$) (voir Fig. II. 19(b)).

A partir des relations de dispersion du modèle de Kronig-Penney (Fig. II.19(c)), cette fréquence correspond à l'intersection des deux relations de dispersion :

$$\kappa_A(f_{r2}) = \kappa_B(f_{r2}) \quad (\text{II.17})$$

ou d'une manière équivalente à la condition

$$\lambda_A(f_{r2}) = \lambda_B(f_{r2}). \quad (\text{II.18})$$

Cette égalité en termes d'intensités de pic delta dans le potentiel mécanique désordonné, traduit une situation d'un ordre parfait. Par conséquence, à cette fréquence, donnée par :

$$f_{r2}^2 = \frac{M_B f_B^2 - M_A f_A^2}{M_B - M_A} \quad (\text{II.19})$$

(valable uniquement dans le cas d'un désordre binaire de masse ($M_B \neq M_A$)), il n'est désormais plus possible de distinguer entre éléments défaut et hôte dans un système binaire.

Constatant que l'origine de cette résonance provient essentiellement de l'indiscernabilité des éléments hôte et défaut (indépendamment de la configuration dimère), la réponse de la transmission et de la longueur de la localisation du désordre binaire non corrélé montre l'existence d'une mini bande de modes étendus autour de la même fréquence

f_{r2} . Ceci nous amène à confirmer que cette résonance dépend plutôt du caractère individuel du défaut.

Aussi tout en étant disposé par dimère, chaque défaut reste indiscernable par rapport à ses voisins hôtes (de part et d'autre du défaut dimère). Ceci explique la persistance de cette résonance y compris dans le modèle du dimère aléatoire.

D'une manière générale, nous pouvons confirmer que les résonances dans les systèmes mécaniques binaires masse-ressort proviennent de deux situations d'origine indépendantes :

1. la transparence du motif dimère à l'intérieur de la structure hôte.
2. l'indiscernabilité entre éléments défaut et hôte.

Par conséquent, en se basant sur une démarche similaire à celle de Wu et al. [18] puis généralisée par X.Q. Huang [22] dans le cadre de la théorie des liaisons fortes (voir Eq. I. 23), cherchons par analogie la condition de résonance généralisée dans le modèle de Kronig-Penney. Dans cet objectif, nous utiliserons la formule de Poincaré (Eq. II.10) appropriée pour décrire l'évolution récursive de l'équation d'onde $y_n = y(x_n)$ le long de toute la structure [30].

Conformément aux deux situations de transparence mentionnées plus haut, la condition générale de la résonance dans le système binaire A, B est donnée par :

$$\begin{pmatrix} 2\kappa_B(f) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = \eta_1 \begin{pmatrix} 2\kappa_A(f) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \eta_2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.20})$$

où η_1 et η_2 sont deux constantes numériques. En développant cette équation, les résonances généralisées dans l'effet dimère s'expriment par la relation :

$$\kappa_B(f)(\kappa_B(f) - \kappa_A(f)) = 0 \quad (\text{II.21})$$

Celle-ci dépend principalement des relations de dispersion du modèle de Kronig-Penney des motifs hôte $\kappa_A(\lambda)$ et défaut $\kappa_B(\lambda)$.

Il est à remarquer que dans les deux cas précédents des systèmes électronique et mécanique de masse, seule la résonance de la transparence du motif dimère pouvant être vérifiée à travers la condition conventionnelle $\kappa_B(f) = 0$. Du fait de l'allure uniforme du potentiel électronique (Eqs. (I.29 et I.35)) [6] et parabolique du système mécanique (Eq.(II.14)), la condition de la résonance d'indiscernabilité des éléments ($\kappa_B(f) - \kappa_A(f) = 0$), ne pouvant apparaître.

1. Nature des modes de transmission résonants.

Faisant suite à la démonstration analytique précédente, la nature des modes de transmission à chaque type de résonance est identifiée à partir de la description de la fonction enveloppe correspondante.

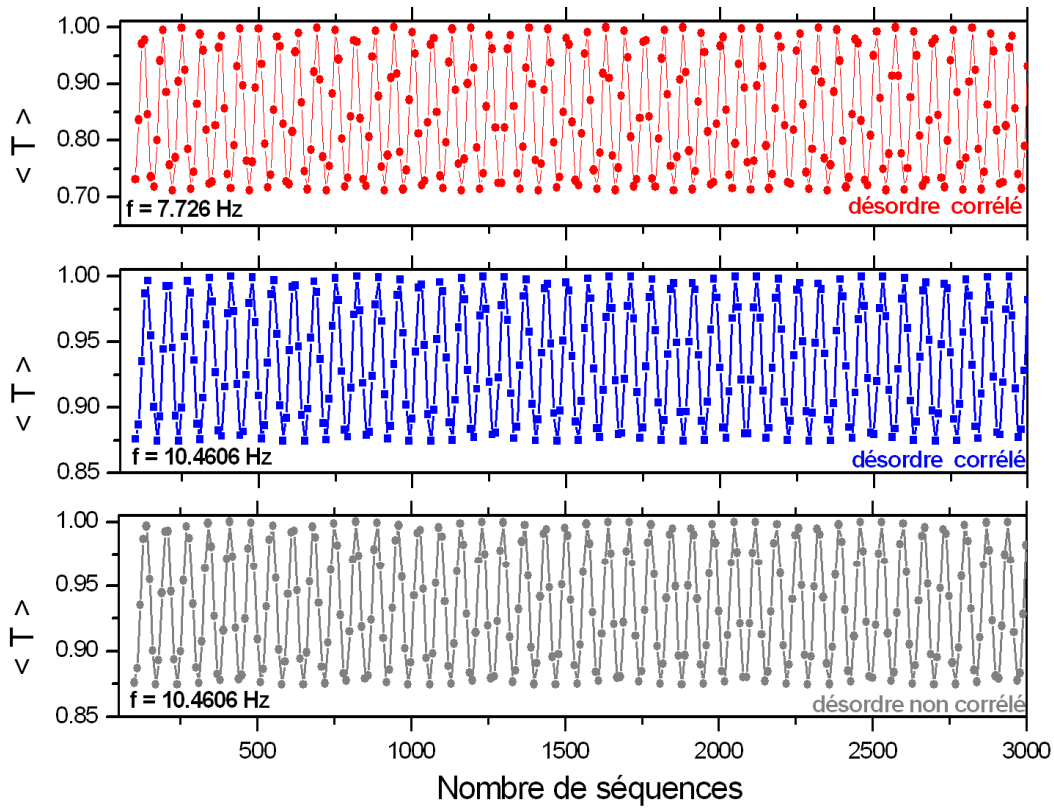


Fig. II.20 Comparaison entre les fonctions enveloppes aux différentes résonances correspondant aux désordres binaires corrélé et non corrélé.

A la fréquence $f = 10.4606 \text{ Hz}$, des ondes identiques aux ondes de Bloch apparaissent aussi bien dans le désordre binaire non corrélé que dans le cas de l'effet dimère. Comme le système est totalement ordonné à la fréquence de l'indiscernabilité des éléments défaut et hôte, procéder à des permutations entre éléments équivalents jusqu'à reproduire la configuration des dimères aléatoires ne peut en aucun cas perturber l'ordre déterministe déjà établi. En présentant des modes de transmission aussi indiscernables par commutativité des motifs A et B, cette résonance prendra le caractère d'une résonance de commutation : Identifiée initialement dans le modèle électronique à potentiel rectangulaire [34], celle-ci répond similairement aux notions de la commutation entre opérateurs physiques en mécanique quantique et la possibilité d'existence de bases communes de fonctions propres. Quant à la résonance dimère située à $f = 7.726 \text{ Hz}$, une onde similaire à l'onde de Bloch y apparaît. La présence d'une réponse périodique traduit aussi le caractère diffusif de ce mode de propagation résonant.

2. La transmission balistique dans le modèle du dimère aléatoire

Nous venons de voir que la corrélation du désordre binaire à courte portée fournit deux types de résonances pour lesquelles les fonctions enveloppes sont périodiques : Tout en interagissant avec le sous réseau hôte, l'onde incidente reproduit soit la transparence du défaut paire, soit l'indiscernabilité entre éléments hôte et défauts. Par ailleurs , pour accéder à un mode de transmission résonant dans un système binaire désordonné, l'onde incidente doit impérativement s'aligner sur un canal permis du réseau hôte obtenu conformément au phénomène d'interférences constructives dans toute la structure.

A partir des caractéristiques du réseau hôte et des fréquences particulières de résonance du défaut, quelles conditions de transparence faut-il imposer pour qu'une onde incidente puisse traverser la structure désordonnée dans les meilleures conditions possibles ?

Pour commencer à répondre à cette question, nous rappelons que dans la structure de bandes des systèmes ordonnés masse-ressort la bande permise est asymétrique sur un domaine de fréquences autour de fréquence libre f_0 (voir Fig. II. 18). Les fluctuations du coefficient de transmission disparaissent et $\langle T(f_0) \rangle \cong 1$. Partons de ce constat et construisons les systèmes désordonnés.

a- La résonance de la commutation balistique

Sachant que la fréquence libre est une grandeur caractéristique dans un oscillateur harmonique, quelle qualité de transmission peut on obtenir sur une corde chargée en système binaire masse-ressort désordonné si les fréquences libres f_A et f_B sont identiques ?

$$f_A = f_B = f_0 \quad (\text{II.23.a})$$

Que deviennent les propriétés de transmission dans le système mécanique de la corde vibrante chargée en masse à la résonance dimère de masse (notée) \bar{f}_r si la contrainte supplémentaire :

$$f_0 \equiv \bar{f}_r \quad (\text{II.23.b})$$

est imposée en présence des ressorts ?

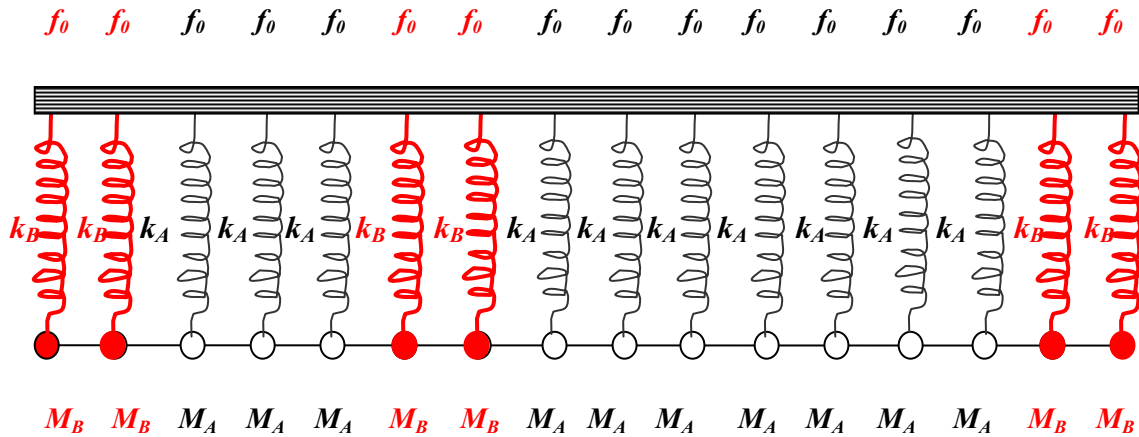


Fig. II.21 Représentation schématique de la contrainte de la résonance de commutation balistique dans le système de la corde chargée en masses-ressorts. ($f_A = f_B = f_0$ et $f_0 \equiv \bar{f}_r$)

Afin de mettre en évidence les conséquences d'une telle manipulation (Eqs. II.23 (a) et (b)), la réponse du système est comparée à celle de la corde vibrante chargée uniquement en masses. Le profil de transmission correspondant à $c_B = 0.20$, est représenté sur Fig. II. 22(a). Le nombre de 200 configurations a été nécessaire pour assurer une convergence acceptable de la transmission moyenne. Contrairement au système de masse (en vert sur Fig. II. 22(a)) et conformément aux prédictions de la condition de résonance généralisée dans le modèle du dimère aléatoire (Eq.II.22), deux résonances apparaissent aux fréquences $f_{r1} = 8.04\text{Hz}$ et $f_{r2} = \bar{f}_r$ respectivement.

En se basant sur les relations de dispersion correspondantes (Fig. II. 22(b)), il est possible d'identifier les origines des résonances : Alors que la première résonance provient de l'effet dimère de masse-ressort ($\kappa_B(f_{r1})=0$), la seconde représente la résonance de commutation $\kappa_A(f_A)=\kappa_B(f_B)$, telle imposée au système (Eq. II.23) à la fréquence de résonance du dimère de masse ($f_A = f_B \equiv \bar{f}_r$).

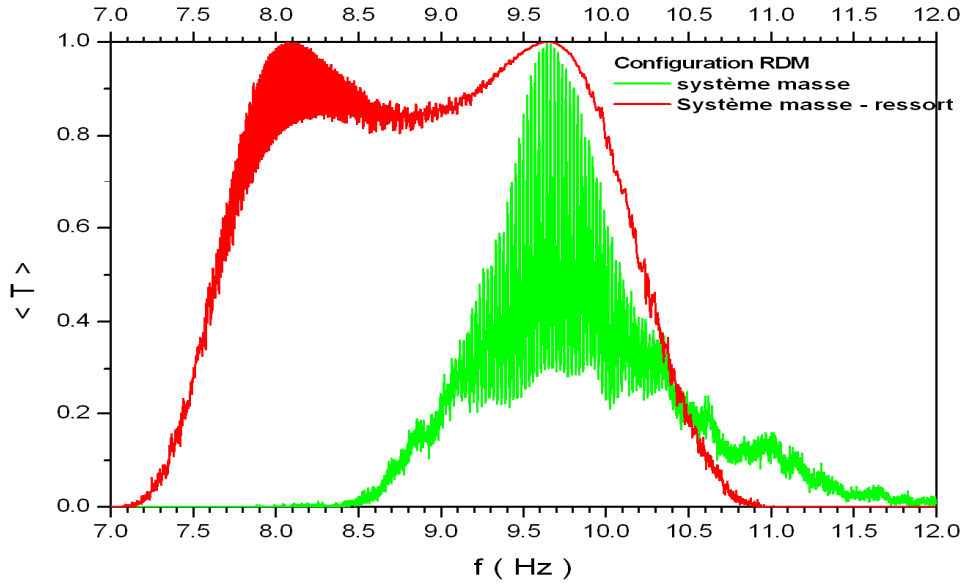


Fig. II.22(a) Comparaison de la réponse de transmission entre systèmes de corde chargée en masse et en masse-ressort dans le cas de l'effet dimère.

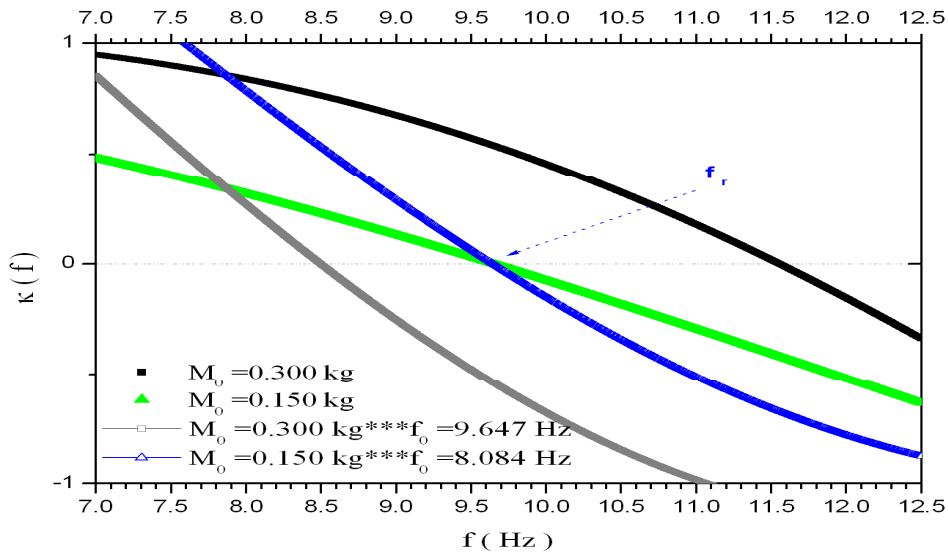


Fig. II.22(b) Identification des résonances à partir des relations de dispersion du modèle de Kronig-Penney pour des systèmes différents de la corde chargée en masse et en masse-ressort.

Sachant qu'à la fréquence de commutation, les intensités des pics $\lambda_n(f) = \frac{K_n}{T_0} \left(1 - \frac{f^2}{f_n^2} \right) \Big|_{n=A,B}$,

sont identiques, l'application de la contrainte de l'indiscernabilité des éléments à cette fréquence rend le potentiel effectif du système binaire désordonné identiquement nul :

$$\lambda_A(\bar{f}_r) = \lambda_B(\bar{f}_r) = 0 \quad (\text{II.24})$$

Dans ces conditions, de nouvelles propriétés de transmission intéressantes devraient apparaître.

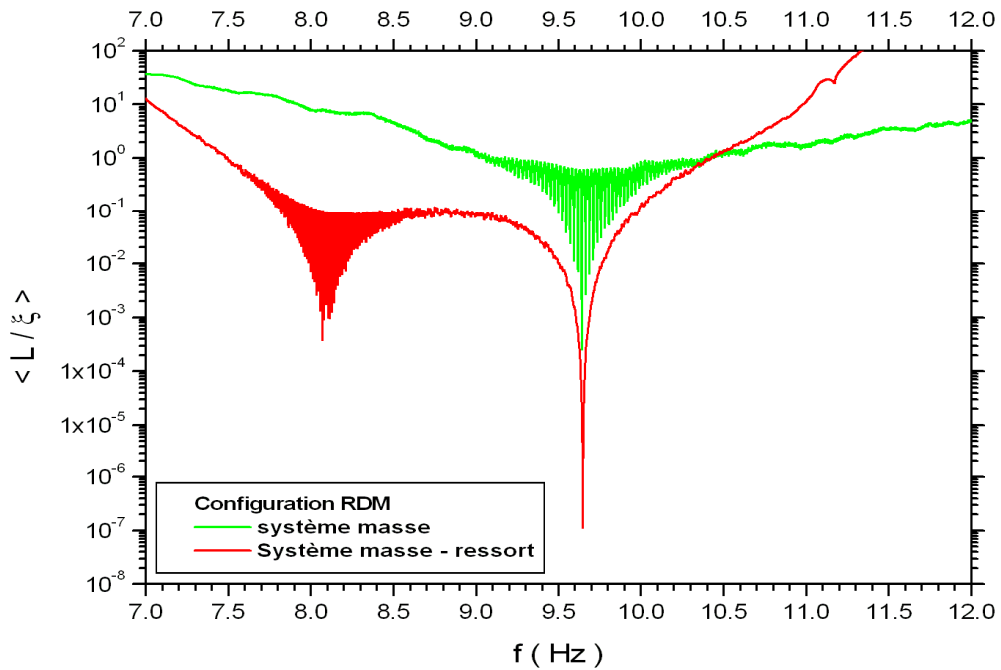


Fig22(c) Comparaison des coefficients de Lyapunov réduits entre systèmes de corde chargée en masse et en masse-ressort dans le cas de l'effet dimère. Singularité plus prononcée à $f = 9.647$ Hz

Le comportement du coefficient de Lyapunov réduit (Fig. II. 22(c)), montre qu'à cette fréquence particulière, la réponse du système présente une singularité très prononcée. La longueur de localisation dans ce système masse-ressort diverge d'une manière extrêmement remarquable $\xi_{\text{masse-ressort}}(\bar{f}_r) = 10^4 \xi_{\text{masse}}(\bar{f}_r)$ par rapport au celle du dimère de masse. Un mode de transmission plus étendu est ainsi obtenu.

Nature des modes de transmission

Afin d'identifier la nature des modes de transmission aux différentes résonances $f_{r1} = 8.084 \text{ Hz}$ et $f_{r2} = 9.647 \text{ Hz}$ (et à leurs voisinage), l'allure de la fonction enveloppe correspondante sur la longueur du système est examinée à partir de $\langle T(N) \rangle$ (Fig. II. 23(a))

A la résonance dimère ($f_{r1} = 8.084 \text{ Hz}$), le mode de transmission est similaire au mode de Bloch dans un ordre parfait. A son voisinage, $f = 0.99 f_{r1}$, l'effet du désordre est sensiblement ressenti sur de grandes distances. Il devient de plus en plus significatif à partir de $f = 0.98 f_{r1}$ avec la décroissance exponentielle remarquable de la fonction enveloppe. Sur une longueur $L = 3000 d$, (correspondant à la présence de 300 dimères répartis aléatoirement), $\langle T \rangle$ diminue jusqu'à 35 % de sa valeur initiale.

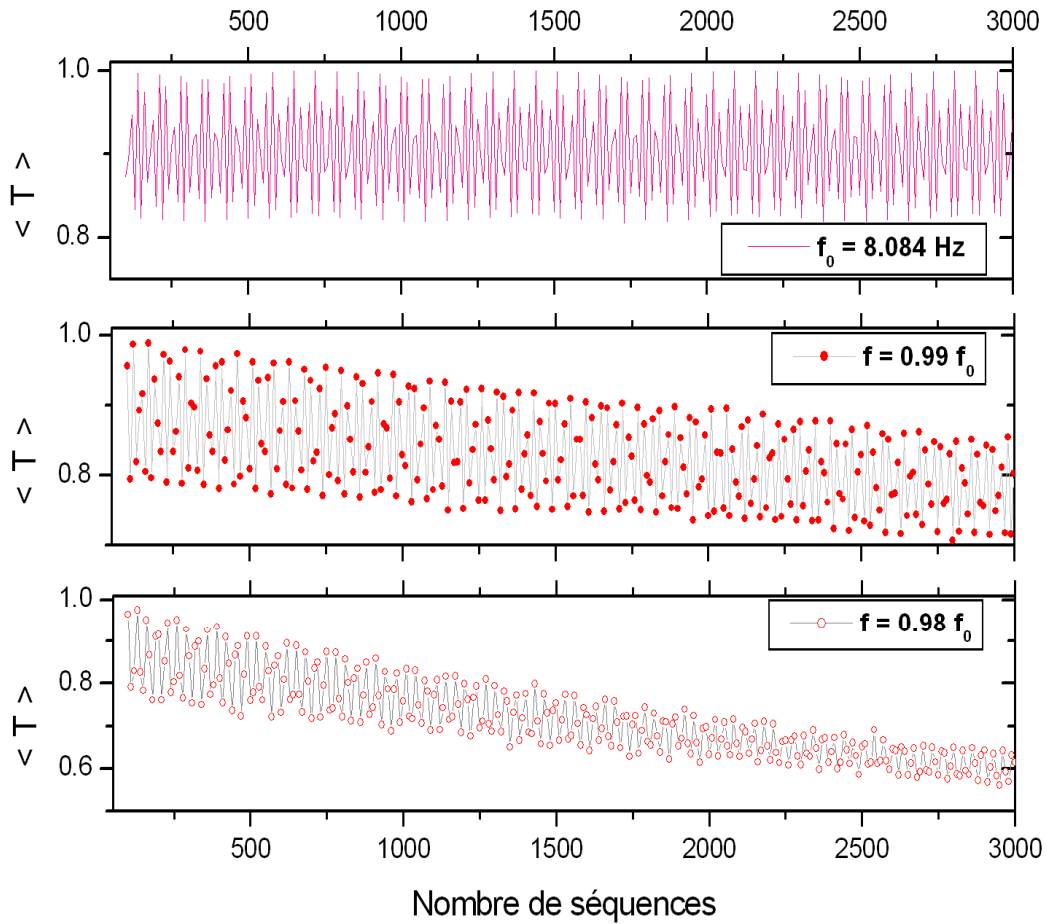


Fig. II. 23 (a) Effet du désordre sur la caractère diffusif de la résonance dimère dans le système masse-ressort.

Par ailleurs, à la fréquence de commutation établie sur l'indiscernabilité des fréquences libres des éléments hôtes et défauts, le profil de transmission est fondamentalement différent : $\langle T(N) \rangle = 1$ indépendamment de la taille du système (Fig. II. 23(b)).

Comparativement aux cas précédents du système électronique et à la corde chargée uniquement en masses, la disparition de la fonction enveloppe périodique (qui caractérise le phénomène de la diffusion élastique dans les systèmes ordonnés) est essentiellement due à l'absence de tout élément diffuseur à l'intérieur du système. Disposant de cellules masse-ressort parfaitement transparente ($\lambda_n(f_n)|_{n=A,B} = 0$) à la résonance de commutation, le mode de propagation devient totalement libre sur son parcours le long de ce système effectivement ordonné. Le régime de transmission balistique est ainsi obtenu.

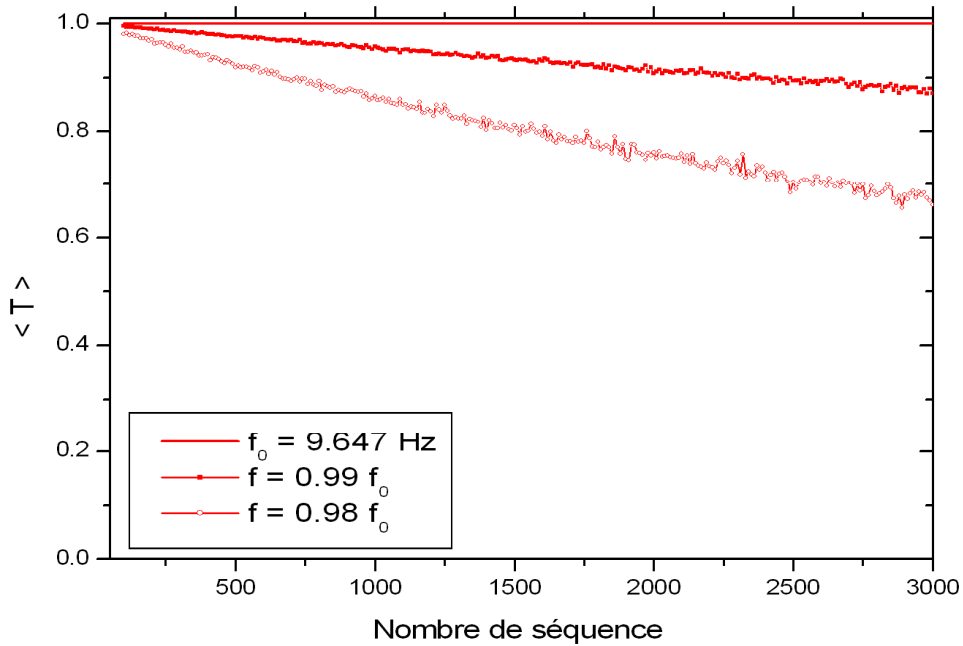


Fig. II. 23 (b) Effet du désordre autour de la résonance de commutation balistique dans le système masse-ressort.

Au voisinage de cette résonance de commutation balistique, $\langle T \rangle$ décroît linéairement en fonction de la longueur du système. Cette décroissance linéaire est d'autant plus importante lorsque la fréquence d'incidence s'éloigne de la résonance de commutation balistique.

b- La résonance dimère balistique

Constatant de plus près, la nature étendue des modes de transmission aux différentes résonances : élastiquement diffusif à la résonance dimère $f_{rB} = 8.04 Hz$ et balistique à la résonance libre $f_A = f_B$ respectivement, que devient la transmission à la résonance dimère f_{rB} si celle-ci coïncide avec la fréquence libre du réseau hôte ?

La contrainte équivalente $f_{rB} = f_A$ est représentée sur la configuration suivante (Fig. II.24)

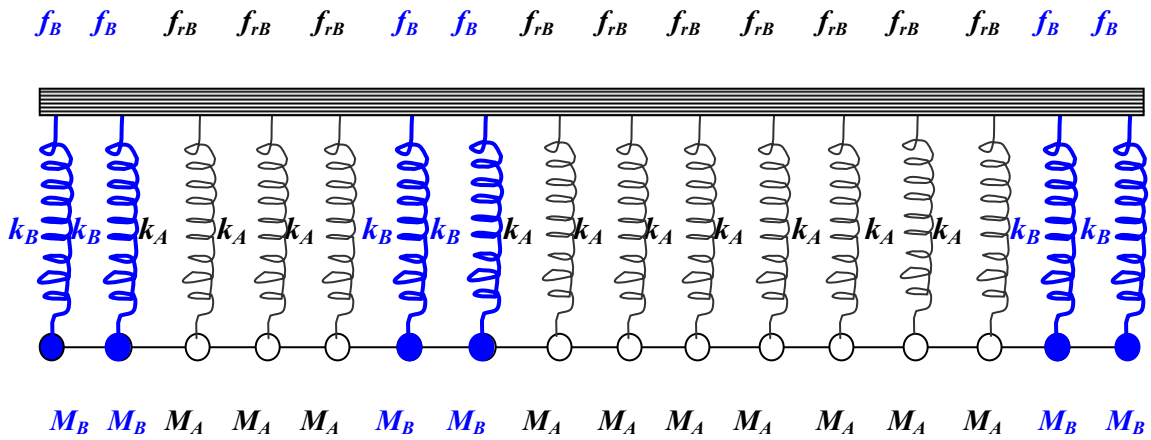


Fig. II.24 Représentation schématique de la contrainte de la résonance dimère balistique dans le système de la corde chargée en masses-ressorts.

En préservant les mêmes paramètres que ceux du système hôte précédent et conformément aux relations de dispersion du modèle de Kronig-Penney, le défaut $M_B = 0.150 \text{ kg}$, $f_B = 8.084 \text{ Hz}$ est le plus approprié pour vérifier cette contrainte (Fig. II. 25(a)). Pour les paramètres utilisés, seule une résonance de transparence du dimère est prévue à la fréquence $f_r = 9.647 Hz$. Qualitativement, ce pic de résonance dimère a la caractéristique de présenter moins de fluctuations dans le profil de transmission par rapport au cas de la résonance dimère précédente (courbe rouge sur Fig. II. 25(b)). En observant de plus près, le comportement du coefficient de Lyapunov réduit à la résonance dimère (Fig. II. 25 (c)), nous remarquons la présence d'une singularité très semblable à celle déjà obtenue dans le cas de la résonance de commutation balistique. Qualitativement, ceci nous amène à penser que le caractère conventionnel de la résonance dimère peut aussi avoir une signature balistique.

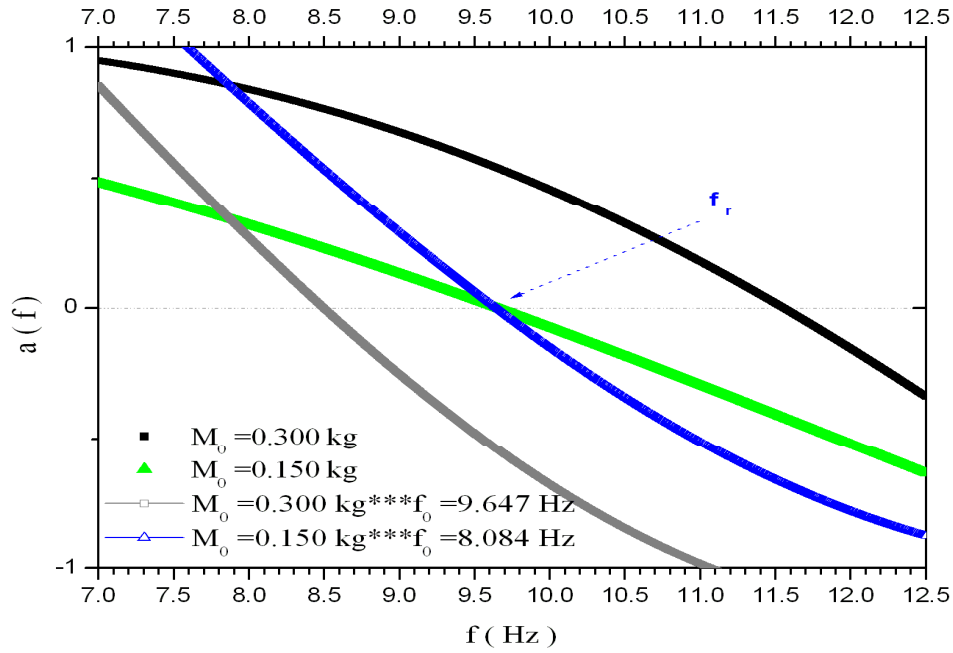


Fig. II. 25(a) Vérification des paramètres reproduisant la contrainte du dimère balistique

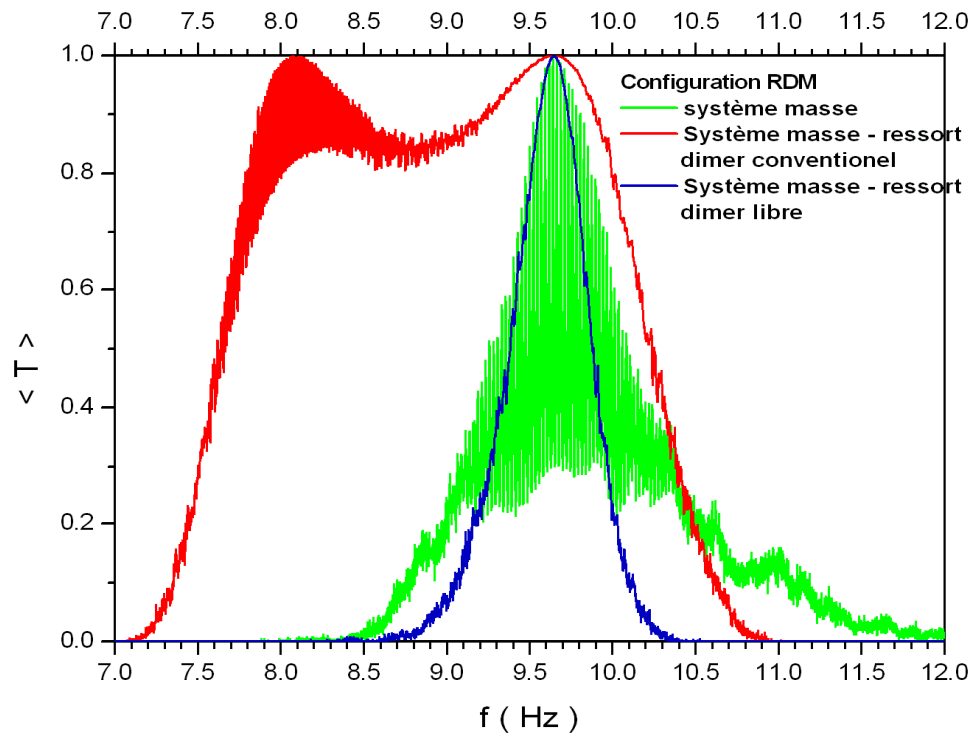


Fig. II. 25(b) Comparaison entre les profils de transmission correspondant aux systèmes de la corde chargée en masse et en masse-ressort dans le cas de l'effet dimère.

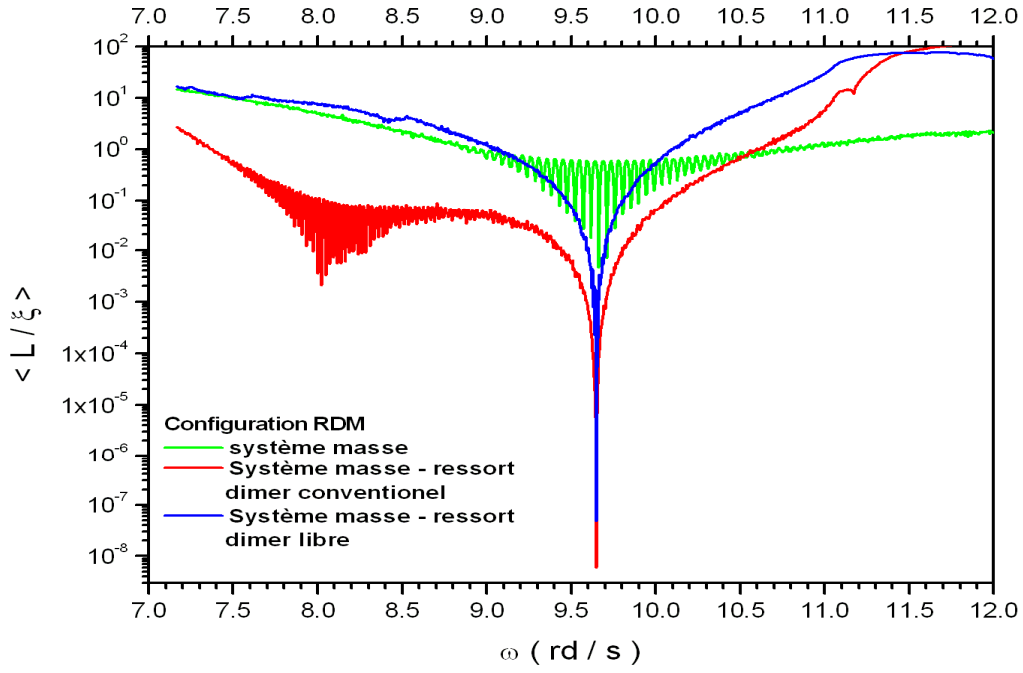


Fig. II.25(c) Comparaison entre les coefficients de Lyapunov réduits entre systèmes de corde chargée en masse et en masse-ressort dans le cas de l'effet dimère.

Pour vérifier cette hypothèse, la nature du mode de transmission à la résonance dimère est examiné. A travers Fig. II. 25 (d), $\langle T(N, f_0) \rangle = 1$ le long du système. Une substitution du régime diffusif par la transmission balistique à la résonance dimère est ainsi réalisée.

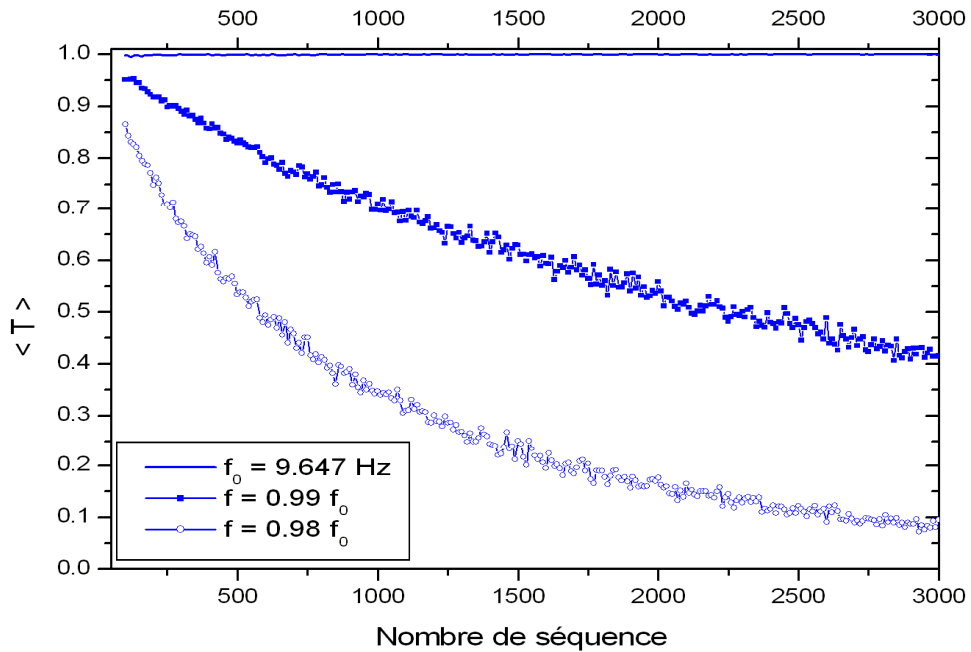


Fig. II. 25 (d) Effet du désordre sur la résonance dimère balistique dans le système de la corde chargée en masses-ressorts.

Par ailleurs, avec la décroissance exponentielle de $\langle T(N) \rangle$ autour de la résonance dimère balistique (Voir Fig. II. 25 (d)), la transmission est plus susceptible à l'effet du désordre. Ceci est essentiellement dû à la présence physique des défauts reproduisant moins l'ordre parfait autour de la résonance.

c- Conclusion

La propagation des ondes transversales mécaniques dans un système unidimensionnel a été décrite en présence de la corrélation de désordre à courte échelle. Disposer aléatoirement des paires de défauts de masse dans une corde vibrante, supprime la localisation d'Anderson à certaines fréquences et fournit au système désordonné des modes de transmission étendus, similaires à ceux de l'onde de Bloch dans des systèmes ordonnés. En présence de défauts dimère totalement transparents, l'onde mécanique incidente exploite un canal autorisé de la bande permise du sous réseau hôte pour se propager quasi-librement à travers tout le système. C'est l'effet dimère conventionnel, tel identifié dans le système électronique à distribution de Dirac.

Cependant, en présence de ressorts, une nouvelle cellule masse-ressort est considérée. L'interaction supplémentaire sur la masse induite par le ressort modifie la réponse spectrale des systèmes binaires de masse correspondants. En se basant sur le modèle de Kronig-Penney, nous avons démontré que dans le modèle du dimère aléatoire, deux résonances sont probables : En plus de la résonance dimère conventionnelle relative à la transparence du motif défaut dimère, une résonance de commutation apparaît lorsque les deux cellules hôte et défaut sont équivalentes. Ne pouvant distinguer entre éléments hôte et défaut, une configuration d'un ordre parfait s'installe dans la structure désordonnée justifiant ainsi le caractère de l'onde de Bloch à la résonance de commutation.

Avec la possibilité de maîtrise des paramètres masses et ressorts, la qualité de transmission dans les systèmes de masses peut être améliorée vers un régime de transmission balistique. La résonance de commutation balistique est obtenue lorsque $f_A = f_B$ alors que la résonance dimère balistique vérifie $f_{rB} = f_A$. La fréquence f_{rB} étant celle de la résonance défaut dimère masse-ressort et f_A (f_B) la fréquence libre du motif hôte (défaut). (Consulter le tableau récapitulatif II. 2)

d- Application : Etude des filtres optiques balistiques

Motivés par les réponses balistiques enregistrées dans la suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels par effet dimère, l'étude des propriétés de transmission des structures masse-ressort est appliquée aux filtres mécaniques. Partant du modèle conventionnel du dimère mécanique, tel que examiné par Bouhafs [25], nous présentons dans cette partie les améliorations susceptibles d'apparaître sur la qualité de transmission de ces systèmes lorsque la procédure d'alignement des résonances est prise en considération. Le champ d'application de l'effet dimère balistique est aussi élargi aux alliages hôtes désordonnés. La qualité de transmission est décrite en fonction du taux de désordre de masse. Rappelons que les réponses du système sont données à partir des valeurs moyennes de la transmission $\langle T \rangle$ et du coefficient de Lyapunov réduit $\langle \frac{L}{\xi} \rangle$ (L étant la taille et ξ la longueur de localisation).

Soit un système masse-ressort de $N = 800$ cellules régulièrement espacées dans un réseau periodique unidimensionnel de paramètre de réseau $d = 0.05 \text{ m}$. Une distribution binaire de masse $M_A = 0.1 \text{ kg}$, $M_B = 0.2 \text{ kg}$ et $c_B = 0.40$ définit le désordre de masse tandis que les ressorts sont choisis de manière identique ($K_n = K = 10 \text{ N/m}$) [25].

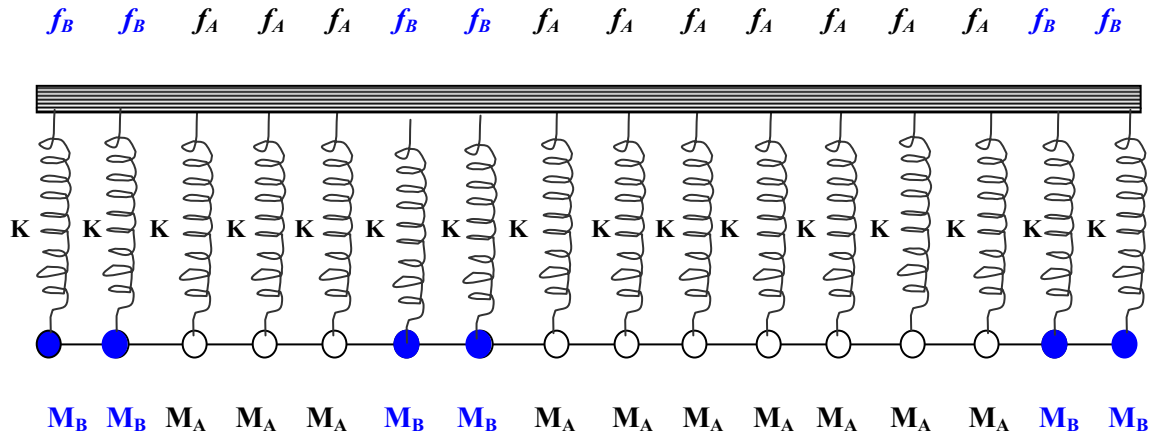


Fig. II.26 Représentation schématique du système considéré [25]

A partir des relations de dispersion du modèle de Kronig-Penney correspondantes aux motifs défaut et hôte, nous pouvons affirmer que seule la condition de la résonance dimère conventionnelle (Eq. II.22) est vérifiée.

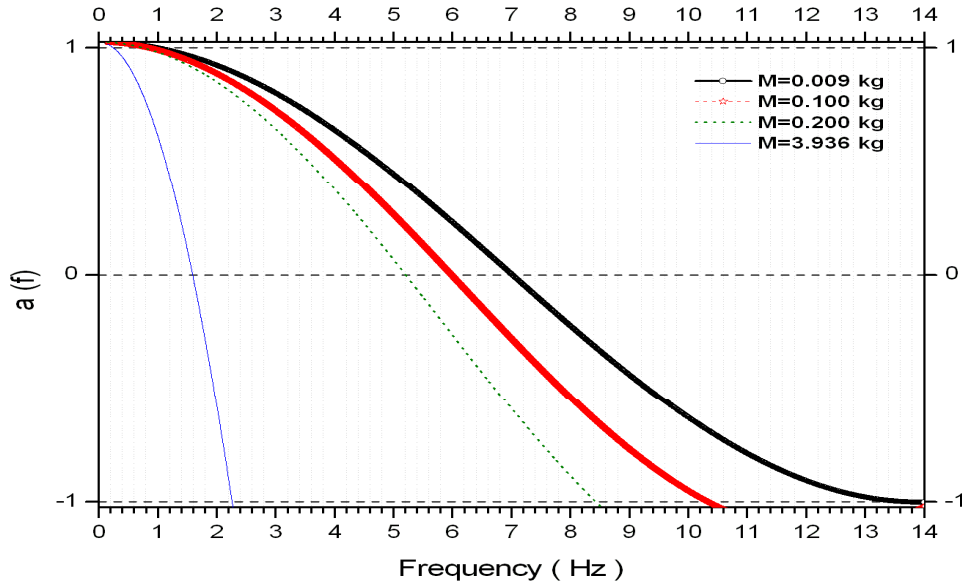


Fig. II. 27(a) Relations de dispersion de plusieurs systèmes de la corde vibrantes chargée en masse-ressort
($K = 10$ N/m et masses M différentes)

Conformément au résultat de Bouhafs [25], un pic de transmission $\langle T \rangle \cong 1$ est observé au voisinage de la fréquence $f_r = 5.20 \text{ Hz}$. Présentant un coefficient de Lyapunov $\frac{1}{\xi(f_r)} \rightarrow 0$, ce mode étendu est caractérisé par une longueur de localisation $\xi(f_r) \approx 300L$. En se basant sur les précédentes confirmations sur la nature des modes résonants dimère, cette résonance ne peut être qu'équivalente à celle d'un mode similaire de Bloch [6,18, 23]. Un pic de transmission unité résulte d'une suppression de la localisation d'Anderson à la fréquence de transparence du motif dimère. Cette résonance présente une largeur de résonance $\delta = 1.20 \text{ Hz}$ conforme au résultat précédent [25]. (voir Figs. II.28 (c) et 29 (a)). Une fenêtre de résonance s'ouvre ainsi dans le spectre de transmission sous forme d'un filtre mécanique. Seules les ondes de fréquences appartenant la bande passante du filtre sont les plus probables à traverser considérablement ce système désordonné.

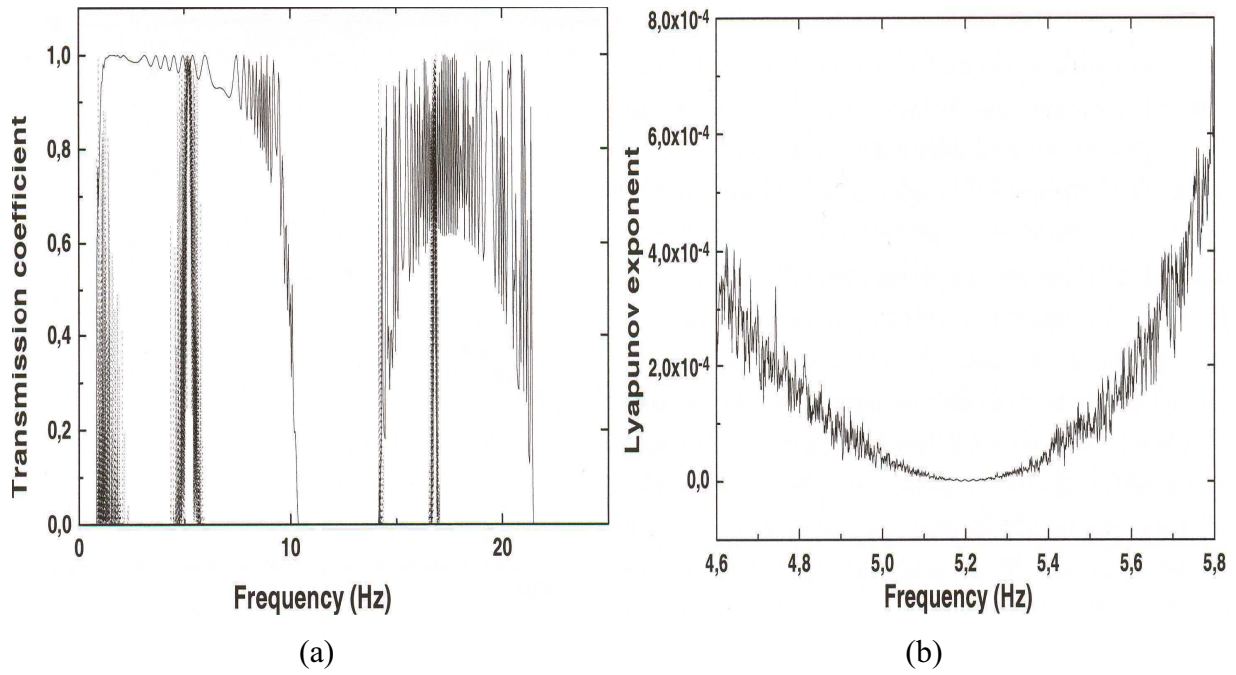


Fig. II.28 Apparition des pics de résonances dimère dans les réponses moyennes de la transmission (a). Le coefficient de Lyapunov atteint sa valeur minimale à la résonance dimère (b) [25]

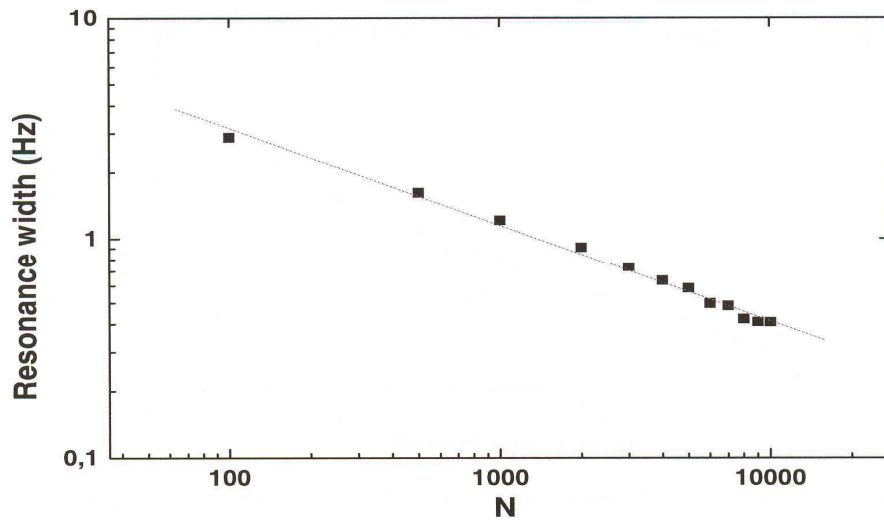


Fig. II. 28 (c) Décroissance quasi linéaire dans la représentation logarithmique de la largeur de résonance en fonction de la longueur du système [25]

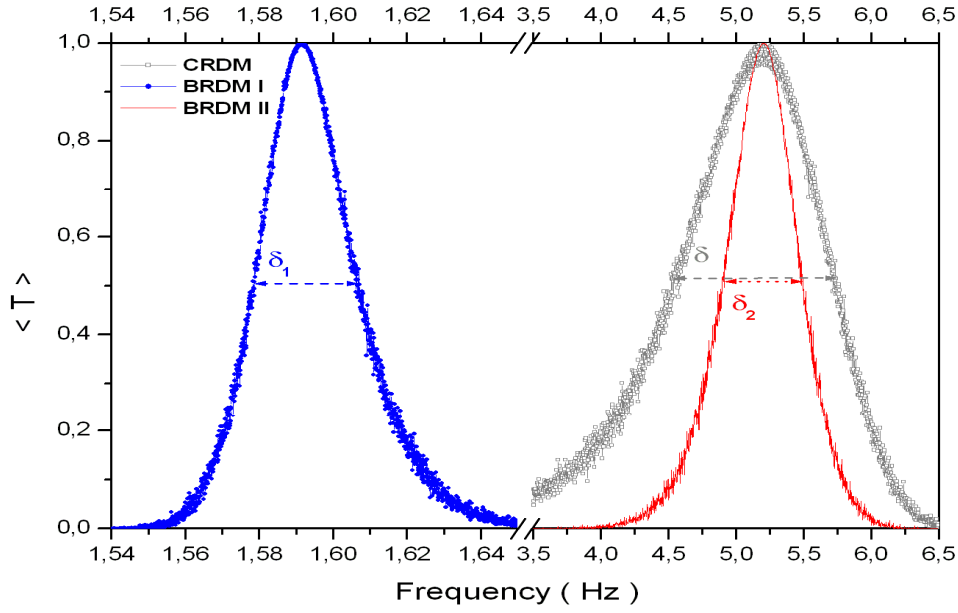


Fig. II. 29 (a) Réponses moyennes de la transmission pour différentes configuration du modèle du dimère aléatoire (RDM) : Conventionnel (CRDM) et balistique I et II (BRDM I et BRDM II)

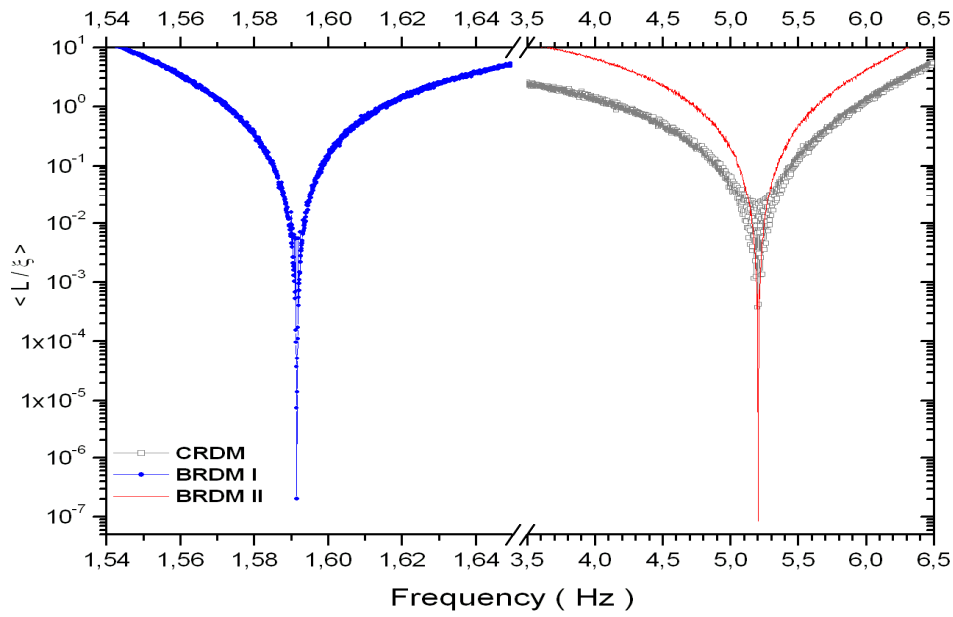


Fig. II. 29 (b) Réponses moyennes du coefficient de Lyapunov réduit pour les différentes configurations du modèle du dimère aléatoire (RDM) : Conventionnel (CRDM) et balistique I et II (BRDM I et BRDM II)

Par ailleurs, avec la possibilité d'ajuster les paramètres structuraux des cellules élémentaires, qu'advient-il à ce filtre mécanique lorsque la fréquence de la résonance dimère

f_{rB} coïncide avec celle la fréquence libre f_A du réseau hôte (ou vice versa) ? A ce sujet, deux systèmes comparatifs à la configuration du dimère conventionnelle sont proposés :

1. La configuration dimère I

Tout en préservant les paramètres du système hôte, identiques à celles du système conventionnel [25] ($M_A = 0.100 \text{ Kg}$), cherchons la cellule (B) correspondante à la réalisation de la contrainte de l'alignement des résonances :

$$f_{rB} \equiv f_A \quad (\text{II.25})$$

A partir de Fig. II. 30 (équivalente à Fig. 5 de [25], décrivant le comportement de la résonance principale du motif dimère en fonction de la masse (lorsque $K = 10 \text{ N / m}$)), la masse défaut la plus convenable, est interpolée à $M_B = 3.396 \text{ kg}$. Ceci est également vérifié sur Fig. II. 25(a) qui reproduit la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney pour la masse considérée plus haut.

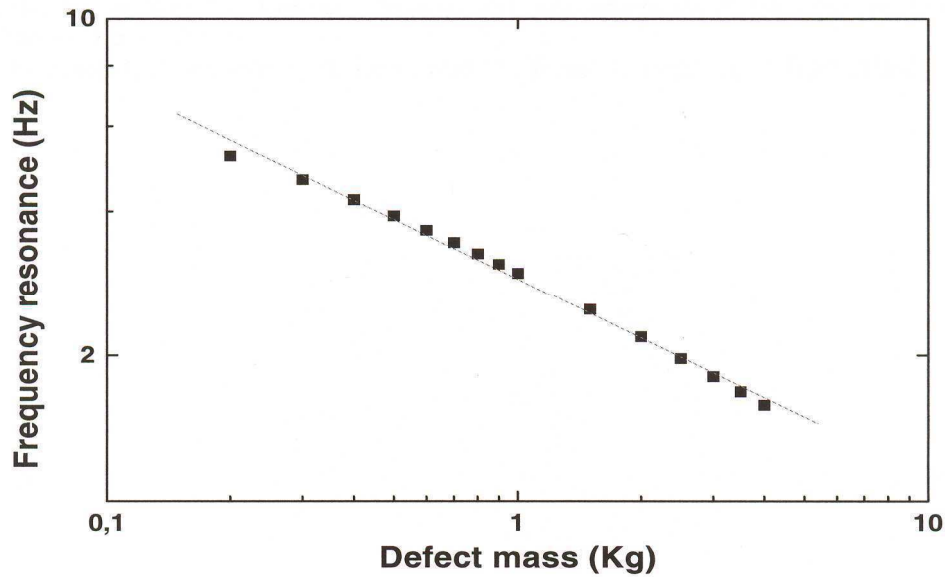


Fig. II. 30 Décroissance de la fréquence de résonance du dimère en fonction de la masse défaut M_B

[25]

Disposant d'une masse défaut M_B , plus importante, cette structure présente un pic de transmission plus fin, de bande passante $\delta_1 \approx 1.5 \cdot 10^{-2} \text{ Hz}$ insignifiante par rapport à celle du cas conventionnel ($\delta = 1.20 \text{ Hz}$), Avec une longueur de localisation plus

importante $\xi(f_{r1}) \approx 3.2 \cdot 10^3 \xi(f_r)$, un mode résonant plus étendu ($\langle L / \xi(f_{r1}) \rangle \approx 1.6 \cdot 10^{-7}$) s'est installé dans le spectre de transmission.

En présence de défauts dimère totalement transparents ($\kappa_B(f_B) = 0$) et un réseau hôte, dont les éléments diffuseurs sont autant transparents ($\lambda_n(f_A = f_B) = 0$), une onde incidente à cette fréquence se propage le plus librement possible.

Dans le but de décrire la nature du mode de transmission dans ces conditions favorables, la réponse moyenne de la transmission $\langle T(N) \rangle$ en fonction de la taille du système, mesurée en nombre de séquences N est examinée. Comparé au cas conventionnel diffusif [25], $\langle T(N) \rangle = 1$ à la résonance, indépendamment de la taille du système. C'est le régime balistique.

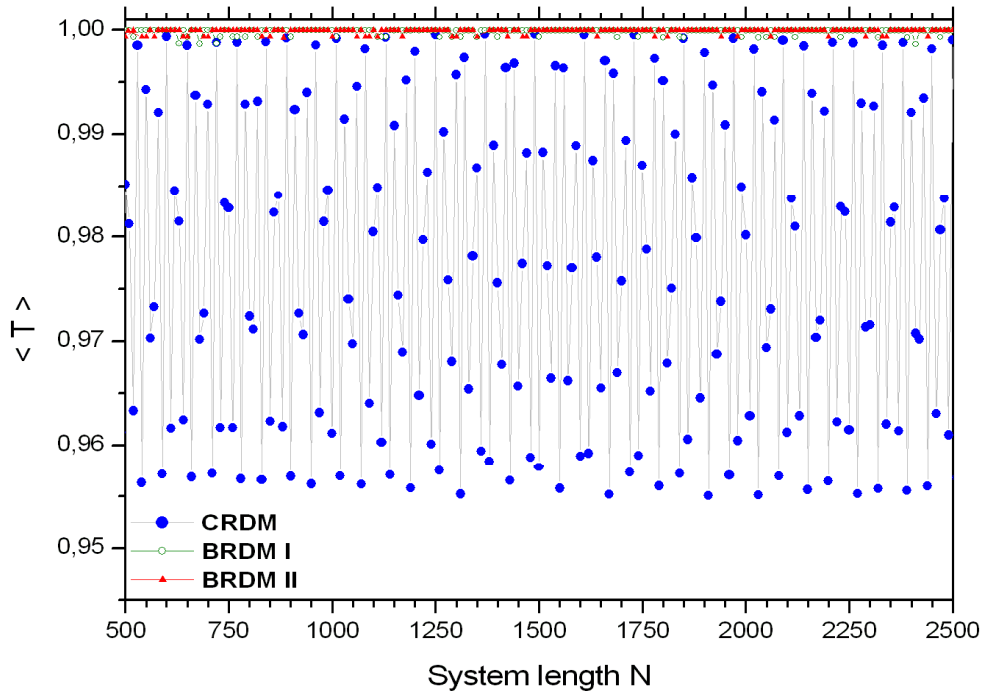


Fig. II. 31 Comparaison entre les différents types de modes résonants en fonction des modèles du dimère aléatoire (RDM) : Conventionnel (CRDM) et balistique I et II (BRDM I et BRDM II).

Les réponses de la première configuration balistique (Ballistic Random Dimer Model I : BRDM I) est décrite en fonction de la largeur de la résonance $\delta_1(N)$ et du facteur de qualité $Q_1(N)$ sur une échelle convenable.

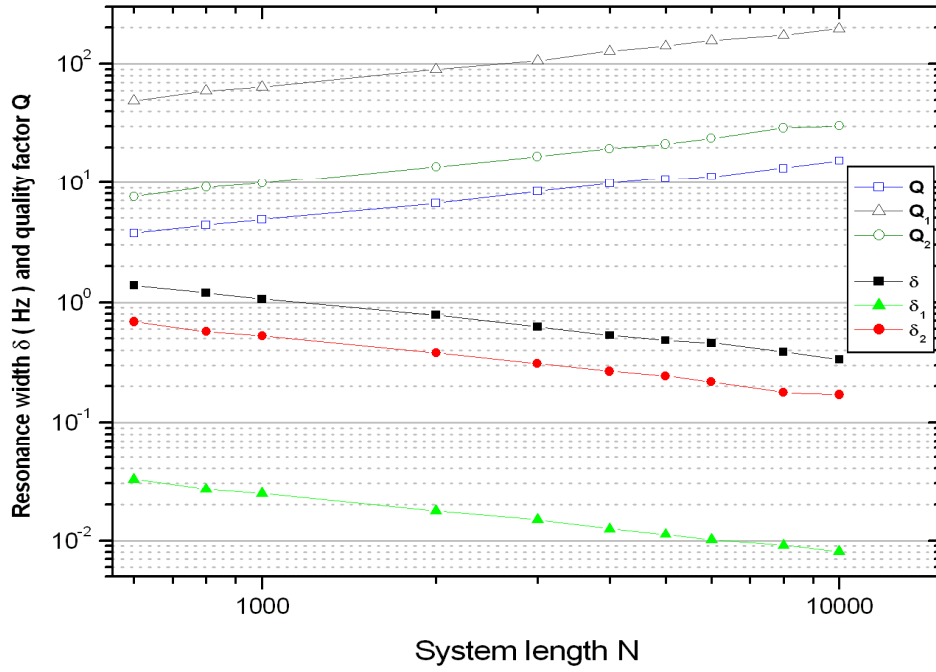


Fig. II. 32 Comparaison entre les caractéristiques du filtre mécanique correspondant (les indices 1 et 2 sont relatifs aux configurations balistiques 1 et 2 respectivement)

Une comparaison directe entre le régime balistique à $f_{r1} \cong 1.59\text{Hz}$ (indice 1) et le régime conventionnel, diffusif à $f_r \approx 5.20\text{Hz}$ montre que :

$$Q_1(N) \approx 13 Q(N) \text{ et } \delta(N) \approx 45 \delta_1(N) \quad (\text{II.26})$$

La représentation logarithmique de ces deux fonctions montre que ces comportements obéissent à des lois de puissance :

$$\begin{cases} Q_1(N) \propto N^\beta \text{ with } \beta = (0.484 \pm 0.006) \\ \delta_1(N) \propto N^{-\bar{\beta}} \text{ with } \bar{\beta} = (0.495 \pm 0.006) \end{cases} \quad (\text{II.27})$$

où β et $\bar{\beta}$ sont des exposants réels. Les valeurs obtenues sont proches de celles de Bouhafs dans le modèle conventionnel [25], tel représenté sur Fig. II. 28 (c).

2. La configuration dimère II

Dans le cas où la constante de raideur $K = 10 \text{ N / m}$, le défaut $M_d = 0.200 \text{ Kg}$ présente une fréquence de résonance dimère $f_r \approx 5.20 \text{ Hz}$. Par conséquent, la cellule hôte la plus appropriée pour vérifier la condition de l'alignement des fréquences caractéristiques :

$$f_{rB} \equiv f_A \quad (\text{II.28})$$

correspond à $M_A \approx 0.009 \text{ Kg}$ (voir Fig. II. 27 (a)).

La transmission moyenne correspondante est représentée sur Fig. II.29(a) (en rouge). Conformément à la condition de résonance conventionnelle, le pic de transmission unité apparaît à la fréquence de résonance dimère $f_{r2} = f_r \approx 5.20 \text{ Hz}$. Présentant une singularité plus prononcée, l'extension spatiale du mode de transmission à cette résonance s'est élargie ($\xi(f_{r2}) = 3.5 \cdot 10^4 \xi(f_r)$). Répondant aussi à la condition de résonance dimère balistique, le profil de transmission présente moins de fluctuations autour de la résonance par rapport au cas conventionnel et une largeur à mi-hauteur réduite de moitié ($\delta_2 = \frac{\delta}{2}$). La qualité de transmission est de nouveau améliorée.

Sur Fig. II. 32, $\delta_2(L)$ et $Q_2(L)$ sont calculées et représentées sur la même échelle logarithmique. Présentant des courbes parallèles par rapport au cas précédents, des comportements en lois de puissances identiques sont observés, leurs comportements sont décrits par des exposants β and $\bar{\beta}$ à valeurs universelles. Cependant, en constatant que :

$$Q_2(N) \approx 2 Q(N) \quad (\text{II.29})$$

cette configuration est moins attractive que la précédente (configuration 1), bien qu'elle préserve la même résonance que celle du dimère conventionnel.

En conclusion, la résonance dimère balistique, exprimée par les conditions :

$$\begin{aligned} \kappa_B(f_{rB}) = 0, \quad \left| \kappa_A(f_{rB}) \right| \leq 1 \\ \text{et} \\ \lambda_A(f_{rB}) = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.30})$$

améliore les propriétés de transmission dans le modèle du dimère aléatoire. L'augmentation de facteur de transmission des filtres mécaniques balistique correspondant dépend fortement de la manière avec laquelle le motif dimère est transparent à la fréquence libre de la cellule hôte.

Un tel phénomène ne peut se réaliser ni dans les systèmes mécaniques de masse, ni dans les systèmes électroniques en pic delta, à cause de l'expression inappropriée de leurs potentiels respectifs pour vérifier $\lambda_A(f_{rB}) = 0$.

3- La configuration dimère balistique dans un alliage hôte désordonné

Dans le but de mieux contrôler les propriétés de la transmission balistique dans le cadre de l'effet dimère et pour une meilleure maîtrise des caractéristiques de la résonance dimère balistique dans les filtres mécaniques, un désordre de type alliage est introduit dans le réseau hôte.

Ce désordre consiste à rendre la structure hôte compositionnellement aléatoire. Préservons la cellule dimère ($M_B = 0.200 \text{ kg}$, $K_B = K_A = K = 10 \text{ N / m}$ pour laquelle la résonance dimère se situe à la fréquence $f_r \approx 5.20 \text{ Hz}$) et considérons le cas d'un désordre de masses généré dans la structure hôte par une distribution $P(M_n)$ rectangulaire, de valeur moyenne M_0 et de largeur ΔM tel que :

$$P(M_A) = \begin{cases} \frac{1}{2\Delta M} & \text{si } M_0 - \Delta M < M_A < M_0 + \Delta M \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{II.31})$$

Lorsque le désordre $M_0 = 0.100 \text{ kg}$ et $\Delta M = 0.100 \text{ kg}$, est incorporé dans la structure hôte, la résonance dimère $f_r \approx 5.20 \text{ Hz}$ (correspondant à $\Delta M = 0. \text{kg}$) disparaît entièrement du spectre de transmission. Le système hôte est devenu suffisamment désordonné pour permettre à la localisation d'Anderson de rendre le milieu de propagation totalement

réfléchissant (sur le domaine de fréquence considéré autour de f_r). La transmission $\langle T(f_r) \rangle|_{\Delta M=M_0} \approx 0.02$ est négligeable et à la fréquence de résonance dimère (correspondant à $\Delta M = 0 \text{ kg}$), le coefficient de Lyapunov réduit, passe de $\langle \frac{L}{\xi(f_r)} \rangle|_{\Delta M=0} \approx 10^{-4}$ à la valeur $\langle \frac{L}{\xi(f_r)} \rangle|_{\Delta M=M_0} \approx 5$. Les modes de transmission correspondants sont remarquablement localisés (voir courbes en gris sur Fig. II. 33(a) et 33(b)).

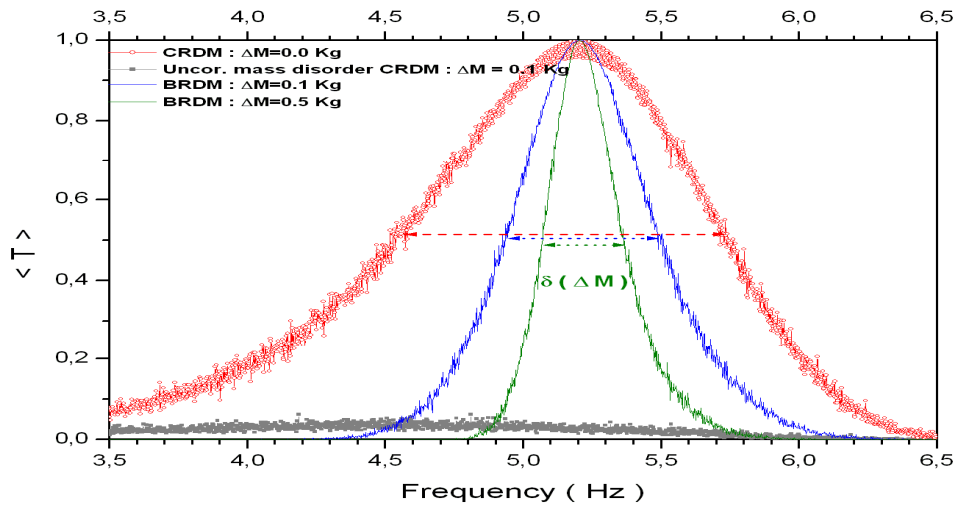


Fig. II. 33(a) Profil de transmission des configurations dimère dans le cas de désordre type alliage dans la structure hôte. Du modèle conventionnel (CRDM) au modèle balistique (BRDM)

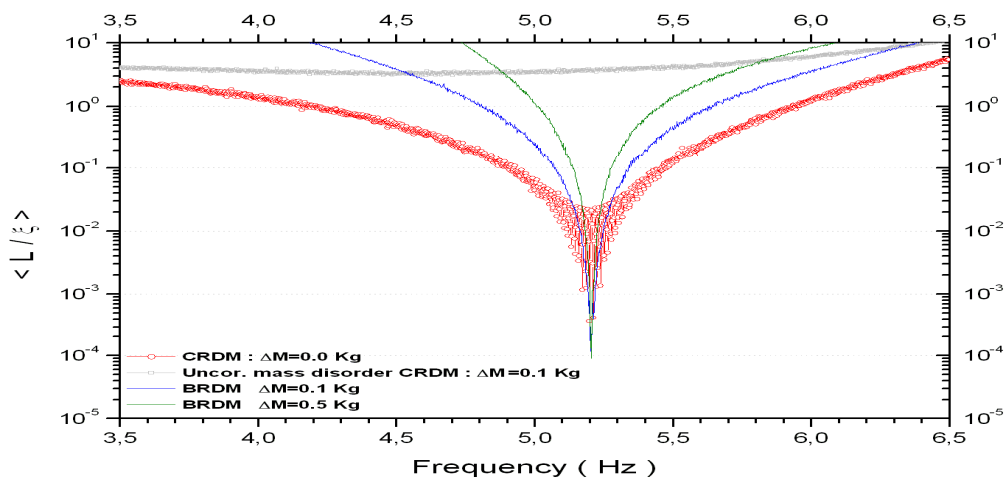


Fig. II. 33(b) Profil de coefficient de Lyapunov réduits relatifs aux configurations dimère étudiées dans le cas de désordre type alliage dans la structure hôte. Du modèle conventionnel (CRDM) au modèle balistique (BRDM)

En observant de plus près la fonction enveloppe relative à ce mode de transmission sur des longueurs plus considérables, la faible valeur de $\langle T(N) \rangle$ décroît exponentiellement le long du système et confirme par la même occasion la nature totalement localisé du mode de transmission (Fig. II. 33 (c), courbe rouge)

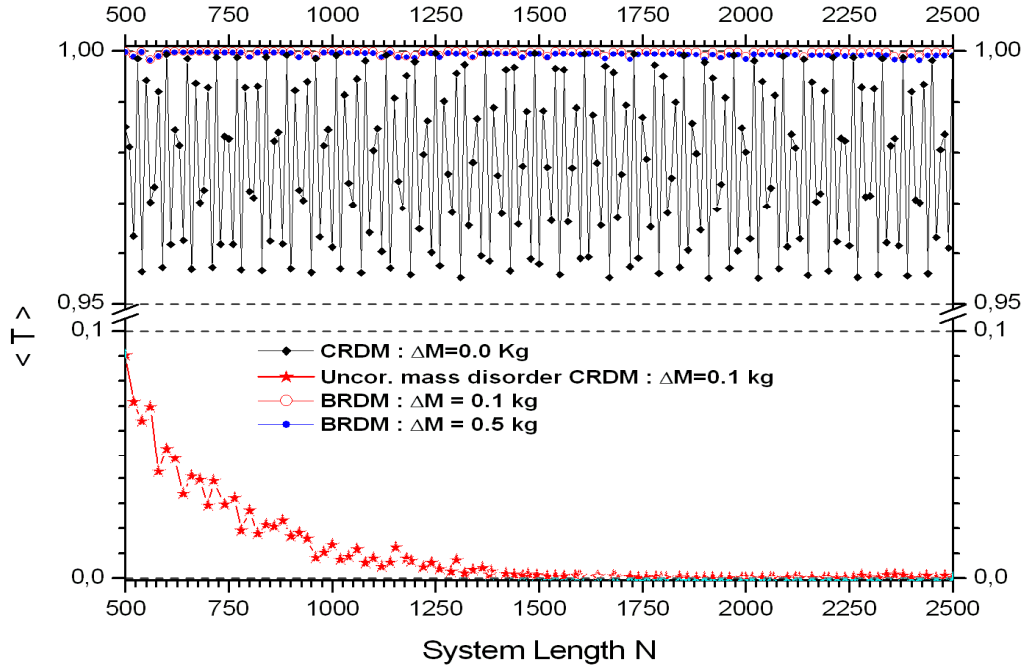


Fig. II. 33(c) Nature des modes de transmission à la résonance pour les différentes configurations dimère étudiées dans le cas de désordre type alliage dans la structure hôte. Du modèle conventionnel CRDM au modèle balistique BRDM

Ayant vérifié que cet alliage est suffisamment désordonné en masse pour rendre la transparence du motif dimère totalement insignifiante (inexploitable), quel moyen devons nous utiliser pour réactiver cette résonance dimère ?

La réponse provient de l'introduction d'un désordre supplémentaire de ressorts de constantes de raideurs K_n . Ce désordre (à vocation constructive donc forcément particulier), obéira au principe de l'alignement des fréquences (tel établi dans la définition de la fréquence de commutation) au niveau de chaque cellule. Ces ressorts dont la distribution reste aussi aléatoire que celle des masses, doivent présenter des fréquences libres $f_n = \sqrt{\frac{K_n}{M_n}}$ identiques à la fréquence de transparence du dimère tel que :

$$f_n \equiv f_{rB} \quad (\text{II.32.a})$$

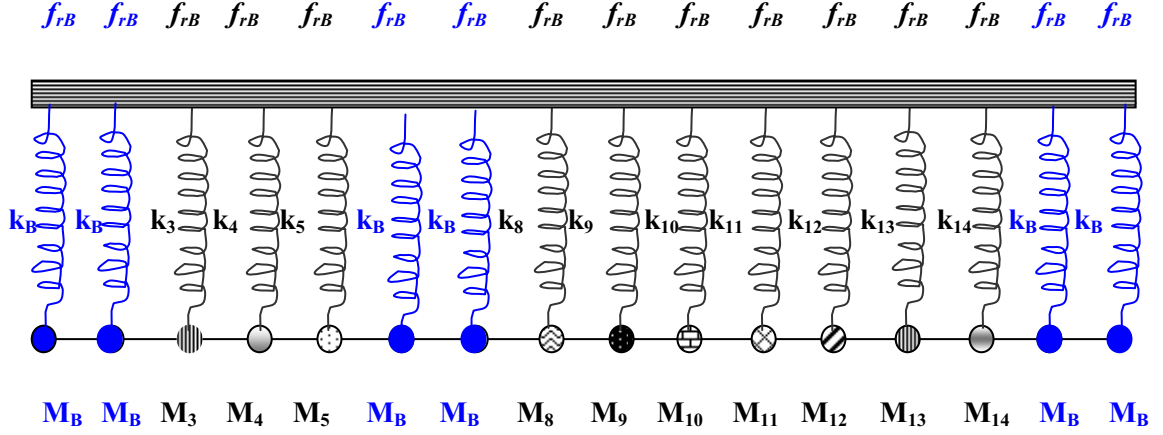


Fig. II. 33 (d) Représentation schématique de l'alignement des fréquences caractéristiques entre la résonance de transparence du défaut et la résonance de commutation balistique de la structure hôte désordonnée

Pour une telle restriction ‘interne’ sur les désordres de masses et de ressorts, un mode délocalisé à une longueur de localisation $\xi \approx 10^4 L$ réapparaît sur le spectre de transmission à la fréquence même ($f_r \approx 5.20 \text{ Hz}$) de la résonance dimère conventionnelle ($\Delta M = 0. \text{ kg}$). (voir Fig. II. 33(a) et (b))

A partir de la description de la fonctionne enveloppe correspondante, ce mode de transmission confirme son caractère balistique (Fig. II. 33 (c), courbe en bleue). La transmission unité indépendante de la longueur du système se justifie par la contrainte de la commutation balistique :

$$\lambda_n(f_{rB}) = 0 \quad (\text{II.32.b})$$

imposée à la fréquence de transparence du dimère le long du milieu hôte désordonné sur chaque site n de la structure désordonnée. Aussitôt ressuscitée, il devient aussi possible de contrôler la qualité de transmission à la résonance balistique par ajustement des paramètres structuraux de la structure hôte.

La taille étant fixée à $N = 800$, l'effet de la variation de la masse est étudié. Le comportement du facteur de qualité $Q(\Delta M)$ en fonction du désordre de masse ($\Delta M \leq 5\text{kg}$) dans le système hôte est décrit sur Fig. II. 34.

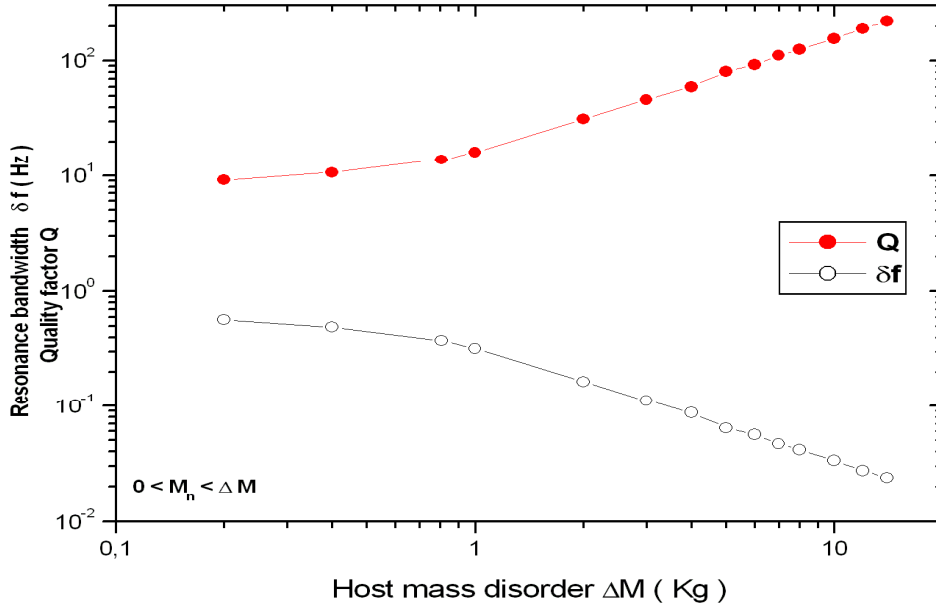


Fig. II. 34 Largeur à mi-hauteur de la résonance et facteur de qualité en fonction du taux de désordre de la structure hôte.

A partir de la représentation logarithmique, nous pouvons constater que le facteur de qualité $Q(\Delta M)$ suit une loi de puissance dont l'exposant α définit deux régimes distincts

$$\begin{aligned} \alpha \approx 0.3 \quad \text{pour} \quad 0.0 \text{ kg} < M_n < 1.0 \text{ kg} \\ \text{et} \\ \alpha \approx 0.5 \quad \text{pour} \quad 1.0 \text{ kg} < M_n < 10.0 \text{ kg} \end{aligned} \quad (\text{II. 33})$$

en fonction du taux de désordre. Dans les deux cas, la qualité de transmission est nettement améliorée.

4- Conclusion

L'étude des propriétés de transmission des filtres mécaniques dans les systèmes binaires aléatoires à désordre corrélé à courte portée a été présentée. L'ajustement convenable des paramètres intrinsèques masse - ressort dans le système de la corde vibrante a permis d'améliorer le rendement des filtres mécanique conventionnels : Des régimes à transmission balistique à la résonance dimère sont obtenus dont la qualité de transmission est décrite par des lois de puissance à exposant universels.

Dans le cas d'alliages désordonnés hôtes, la résonance dimère balistique est restaurée pour autant que la condition de commutation balistique soit préservée sur chaque site du réseau. Par l'incorporation d'un désordre de ressort à vocation constructive, la qualité de la transmission dans ces structures est nettement améliorée avec l'augmentation du taux de désordre de masse. (Consulter le tableau récapitulatif II.3)

III - Conclusion générale

La propagation d'ondes mécaniques dans des chaînes linéaires désordonnées à profils de potentiel différents a été étudiée par analogie au modèle électronique de Kronig-Penney. Conformément à la condition de la transparence du motif dimère dans les systèmes binaires, la résonance conventionnelle de l'effet dimère apparaît aussi lorsque sa fréquence caractéristique de transparence du motif défaut dimère coïncide avec la fréquence d'un canal de transmission permis de la structure hôte. La présence d'un tel motif transparent fournit au milieu de propagation des modes de propagation étendus, diffusifs, reproduisant des situations similaires à celle d'un ordre parfait.

En disposant d'un paramètre supplémentaire dans le profil du potentiel, le système de la corde vibrante chargée en résonateurs masse-ressort est plus instructif. L'utilisation de la condition généralisée de la résonance nous a montré la possibilité de définir une résonance de commutation pour laquelle des modes de Bloch apparaissent.

De ce fait, l'application de la procédure de l'alignement de ces deux résonances (dont les origines sont différentes), sur une fréquence commune a permis d'améliorer les propriétés de transmission de ces systèmes aléatoires à désordre corrélé. A la fréquence libre, commune entre les deux motifs, l'onde propagatrice à la résonance dimère perd son caractère diffusif et devient sous contrôle d'un régime de transmission balistique.

L'insertion d'un désordre de masse dans la structure hôte détruit la résonance balistique et rend le système totalement réfléchissant. Néanmoins, introduire un désordre supplémentaire de ressort à vocation constructive permet de ressusciter cette transition de phase (mode localisé – mode étendu) à partir de la procédure de l'alignement des fréquences. Des filtres mécaniques balistiques de systèmes désordonnés à meilleure qualité de transmission peuvent ainsi être obtenus.

Finalement, au vu des améliorations enregistrées sur les propriétés de transmission fournies par la procédure de l'alignement des résonances par ajustement convenable des paramètres intrinsèques des motifs défaut et hôte, nous pensons que cette manipulation est aussi applicable à d'autres types de systèmes unidimensionnels désordonnés. Par analogie à la

propagation des électrons dans les heterostructures et superréseaux unidimensionnels, nous pensons à la transmission de la lumière dans les cristaux photoniques désordonnés d'autant plus que des études récentes ont montré le phénomène de la suppression de la localisation des photons dans les systèmes stratifiés unidimensionnels [32,33]. Chercher à améliorer la qualité de transmission de ces structures fera l'objet de notre étude dans le chapitre suivant de cette thèse.

Tableaux récapitulatifs

Système masse (d = 0.05 m)

Motif hôte	Motif défaut	Résonance dimère (Hz)
$M_A = 0.300 \text{ kg}$	$M_B = 0.150 \text{ kg}$	9.647

Tableau II. 1 Effet dimère conventionnel dans le système masse.

Système masse-ressort (d = 0.05 m)

Motif hôte	Motif défaut	Fréquence de Résonance(Hz)	Type de résonance
$M_A = 0.300 \text{ kg}$ $f_A = 9.647 \text{ Hz}$	$M_B = 0.150 \text{ kg}$ $f_B = 8.758 \text{ Hz}$	7.726 10.466	Dimère conventionnel Commutation conventionnelle
$M_A = 0.300 \text{ kg}$ $f_A = 9.647 \text{ Hz}$	$M_B = 0.150 \text{ kg}$ $f_B = 9.647 \text{ Hz}$	8.084 9.647	Dimère conventionnelle Commutation balistique
$M_A = 0.300 \text{ kg}$ $f_A = 9.647 \text{ Hz}$	$M_B = 0.150 \text{ kg}$ $f_B = 8.084 \text{ Hz}$	9.647	Dimère balistique

Tableau II. 2 Effet dimère conventionnel et balistique dans le système masse-ressort

Etude des filtres mécaniques balistiques (d = 0.05 m)

Motif hôte	Motif défaut	Fréquence de Résonance(Hz)	Type de résonance
$M_A = 0.100 \text{ kg}$ $K_A = 10 \text{ N/m}$	$M_B = 0.200 \text{ kg}$ $K_B = 20 \text{ N/m}$	5.20	Dimère conventionnel (CRDM)
$M_A = 0.100 \text{ kg}$ $K_A = 10 \text{ N/m}$	$M_A = 3.396 \text{ kg}$ $K_B = 20 \text{ N/m}$	1.59	Dimère balistique (BRDM I)
$M_A = 0.009 \text{ kg}$ $K_A = 10 \text{ N/m}$	$M_B = 0.200 \text{ kg}$ $K_B = 20 \text{ N/m}$	5.20	Dimère balistique (BRDM II)
$M_A = 0.100 \text{ kg}$ $\Delta M_A = 0.100 \text{ kg}$ $K_A = 10 \text{ N/m}$	$M_B = 0.200 \text{ kg}$ $K_B = 20 \text{ N/m}$	-	Localisation dans alliage hôte désordonné
$M_A = 0.100 \text{ kg}$ $\Delta M_A = 0.100 \text{ kg}$ $f_{An} = 5.20 \text{ Hz}$	$M_B = 0.200 \text{ kg}$ $K_B = 20 \text{ N/m}$	5.20	Dimère balistique dans alliage hôte désordonné BRDM
$M_A = 0.100 \text{ kg}$ $\Delta M_A = 0.500 \text{ kg}$ $f_{An} = 5.20 \text{ Hz}$	$M_B = 0.200 \text{ kg}$ $K_B = 20 \text{ N/m}$	5.20	Dimère balistique dans alliage hôte désordonné BRDM

Tableau II. 3 Résonances conventionnelles et balistiques dans les filtres mécaniques à effet dimère (système masse-ressort)

Bibliographie

1. L. Brillouin et P. Parodi, *Propagation des ondes dans les milieux périodiques* (Masson-Dunod, Paris, 1956)
2. F. Bloch , Z. phys. **52**, 555 (1928)
3. S. He, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett **57**, 3171 (1986), S. He, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett. **62**, 1888 (1989); J.D. Maynard, Physica B **197**, 231 (1994)
4. J.D. Maynard, Rev. Mod. Phys. **73**, 401 (2001)
5. S. Parmley et al. Appl. Phys. Lett. **67**, 777 (1993) ; S. Parmley, Am. J. Phys. **63**, 547 (1995)
6. A. Sanchez, E. Macia et F. Dominguez-Adame, Phys. Rev.B **49**, 147(1994) ; **49**,15428 (E), (1994); S. Khaled , J. Phys. Cond. Matt. **19**, 076202 (2007)
7. M.J. McKenna, R.L. Stanley and J.D. Maynard , Phys. Rev. Lett. **69**, 1807 (1992)
8. R. Knapp, G. Papanicolau et B. White, *Nonlinearity and localisation in one-dimensional random media*, Edité par R. Bishop, D.K. Campbell et St. Penvematikos, *Disorder and Nonlinearity*, Springer Series in Solid State Science (Springer, Berlin 1989)
9. Yu S. Kivshar, S.A. Gadeskul, A. Sanchez et L. Vasquez, Phys. Rev. Lett. **64**, 1693 (1990)
10. S.A. Gradeskul and Y.S. Kivshar, Phys. Rep. **216** , 1 (1992)
11. D. Hennig , H. Gabriel et G.P. Tsironis , Phys. Rep, **307** , 333 (1999)
12. P. Dean, Proc. Phys. Soc. **84**, 727 (1964)
13. P.K. Datta, K. Kundo, J. Phys.: Cond. Matt. **24**, 44 65 (1994)
14. F. Dominguez-Adame, E. Macia et A. Sanchez, Phys. Rev.B**48**, 6054 (1993)
15. L.S. Cao, R.W. Peng, R.L. Zhang, X.F. Zhuang, Mu Wang , X.Q. Huang, A. Hu et S.S. Jiang, Phys. Rev. B **72** , 214301 (2005)
16. B. Kramer and A. Mac Kinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993),
17. E.N. Economou, C.M. Soukoulis et M.H. Cohen, Phys. Rev. **B9**, 4399 (1988), H. Dunlap, H.L.Wu et P. Philips, Phys. Rev. Lett. **65**, 88 (1990), P. Philips, H.L.Wu, Sciences **252**, 1805 (1992)
18. H.L. Wu , W. Goff et P. Philips, Phys. Rev. B **45**, 1623 (1992)
19. F.A.B.F de Moura et M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998); F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, Phys. Rev. Lett **82**, 4062 (1999)

20. S.C. Gomez-Carillo, K.M. Fonseca , R.R. Rey-Gonzalez, Braz. J. Phys.**36**, 828 (2006), P.Carpena, P.Bernaola-Galvan, P.Ch.Ivanov and H. E. Stanley, Nature **418**, 955 (2002).
21. E. Macia, Rep. Prog. Phys. **69**, 397 (2006)
22. X.Q. Huang, S.S. Jiang, R.W. Peng, Y.M. Liu, F. Qiu et A. Hu, Mod. Phys. Lett. B. **17**, 1461 (2003).
23. H.Khalfoun, M. Bouamoud, S. Bentata, J. Appl. Sc. **7**, 1131 (2007)
24. H.Khalfoun, S. Bentata, M. Bouamoud, L. Henrard, Phys. Lett. A **372**, 5501 (2008)
25. F. Bouhafs et N. Zekri, Mod. Phys. Lett. B, **15** , 343 (2001)
26. X. Huang, X. Wu et C.Gong, Phys. Rev. B **55**, 11018 (1997)
27. M. Hilke et J.C. Flores , Phys. Rev. B **55**, 10625(1997), M. Hilke, J.C. Flores, F.Dominguez –Adame , Phys. Rev. B **58**, 77 (1998)
28. J.M.Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels*, Alea-Saclay collection, Paris, (1992).
29. C.H. Hodges, J.S.V.**82**, 411 (1982)
30. C. Pierre et E.H. Dowell, J.S.V.**114**, 549 (1987)
31. O. Richoux, C. Depollier et J. Hardy. *Etude de la propagation des ondes mécaniques dans un réseau unidimensionnel avec désordre et / ou nonlinéarités localisées*. Thèse de Doctorat. Université du Maine, Le Mans, France (1999).
32. Z. Zhao, F. Gao, R.W.Peng, L.S. Cao, D. Li, Z. Wang, X.P. Hao, M. Wang, C. Ferrari, Phys. Rev. B **75**, 165117(2007).
33. E.M. Nascimento, F.A.B.F. De Moura et M. Lyra, Phys. Rev B **76**, 115120 (2007).

Chapitre 3

Propagation des ondes électromagnétiques dans les systèmes stratifiés unidimensionnels à désordre binaire corrélé.

Chapitre 3

Propagation des ondes électromagnétiques dans les systèmes unidimensionnels stratifiés à désordre binaire aléatoires

I.	Introduction aux cristaux photoniques et à l'analogie électronique	115
II.	Etude des propriétés de transmission en incidence normale des ondes électromagnétiques dans les films phononiques unidimensionnels aléatoires à désordre binaire corrélé.....	120
	1. Introduction.....	120
	2. Etude des systèmes ordonnés en incidence normale	121
	3. Etude des systèmes binaires désordonnés	128
	a- Le désordre binaire conventionnel	128
	b- Le désordre binaire généralisé	133
	4. Optimisation des résonances de la configuration dimère généralisée	140
	a- Alignement sur la résonance défaut dimère	140
	b- Alignement sur la résonance principale hôte	144
	5. Conclusion	154
III.	Bibliographie	156

Ce chapitre portera sur la propagation des ondes électromagnétiques dans les structures unidimensionnelles stratifiées en analogie avec le comportement des électrons dans les heterostructures. Se présentant en alternance régulière de couches diélectriques différentes, les films photoniques sont appropriés pour reproduire la physique fondamentale du modèle électronique de Kronig-Penney à profil de potentiel rectangulaire.

Conformément à la démarche suivie dans le chapitre précédente, le désordre binaire est examiné dans son aspect conventionnel pour démontrer la suppression de la localisation unidimensionnelle des photons par effet dimère. Généralisé, le système binaire présente un type supplémentaire de résonance dans le spectre de la transmission optique.

Par ajustement convenable des paramètres structuraux (constante diélectrique et épaisseur caractéristiques de chaque couche) des motifs hôte et défaut, nous tenterons de décrire les améliorations susceptibles d'apparaître sur les réponses de la transmission à la résonance dimère. La nature des modes résonants obtenus est examinée et les régimes de transmission plus favorables à la propagation de l'onde sont ainsi identifiés.

Des équivalences avec les résonances apparues dans le système masse-ressort sont également établies.

I. Introduction aux cristaux photoniques et à l'analogie électronique

Un cristal photonique unidimensionnel est une structure périodique qui préserve la symétrie de translation dans une direction (la direction de croissance de la structure) et reste invariant dans les deux autres directions (transversales). Ces structures périodiques de couches planes diélectriques (ou métalliques) sont conçues pour la propagation des ondes électromagnétiques de la même manière qu'un potentiel périodique affecte le déplacement des électrons dans un cristal [1-4]. L'absence de modes propagatifs sur certains domaines de fréquences est quantifiée en bandes interdites : Une onde lumineuse n'y trouve aucun vecteur d'onde réel lui permettant de se propager dans la structure [5].

Entre électrons dans les semi-conducteurs (arrangement périodique de potentiel atomique) et photons dans les milieux diélectriques à modulation périodique, il devient remarquable de constater l'apparition de nouveaux phénomènes en électromagnétisme : Des variétés de bandes de dispersion et de bandes interdites sur des domaines variables de longueurs d'ondes peuvent être obtenues seulement à partir de l'ajustement des paramètres structuraux du système. La propagation des ondes est ainsi modifiée d'une manière maîtrisable [6].

Cependant, ces dispositifs ne peuvent être envisageables sans l'immense développement technologique que les techniques de fabrication de ces structures films ont connues. Les milieux stratifiés croissent artificiellement en utilisant des techniques de l'épithaxie, de la déposition chimique ou l'évaporation sous haut vide. La maîtrise de ces techniques de croissance permet d'ajuster avec une précision assez appréciable, l'épaisseur et la nature des couches déposées [7].

Connu en optique sous le nom de miroir de Bragg [8], le milieu stratifié est équivalent au modèle électronique de Kronig Penney pour lequel toute l'information physique est définie sur une période du système [9]. Le processus de transmission optique dépend

explicitement de la modulation diélectrique dans la cellule élémentaire. Décrivant des couches diélectriques homogènes, la fonction diélectrique correspondante apparaît sous forme de fonction escalier dont la hauteur du palier diffère dans chaque couche. Un profil de barrière et de puits optiques peut ainsi être conçu de la même manière que celle des hétérostructures électroniques et des superréseaux [9-11].

A ce sujet, la physique qui décrit le comportement d'un électron dans ces matériaux quantifie son énergie et le fait déplacer à l'intérieur de mini bandes permises lorsque l'ordre est reproduit à travers tout le système. L'exploitation de ces niveaux d'énergie a aussitôt suscité un intérêt particulier dans la transmission électronique : Depuis l'avènement de la structure double barrière (Fig. III.1), les propriétés de transmission de tels dispositifs électroniques se sont retrouvées nettement améliorées : L'apparition de la résistance différentielle négative dans les caractéristiques I-V de la diode à effet tunnel résonant correspondante fournit aux électrons des conditions de transmission plus favorables en exploitant les canaux de transmission relatifs à ces états quasi-liés [12,14]. Aussi contrairement aux matériaux massifs, la richesse d'une telle structure réside dans l'apparition de ces mini-bandes permises ajustables, de mini-zones de Brillouin dans l'espace réciproque et aussi dans la cohérence du transport obtenue sur des périodes considérables par rapport à celles établies dans les couches fondatrices de la cellule élémentaire [11].

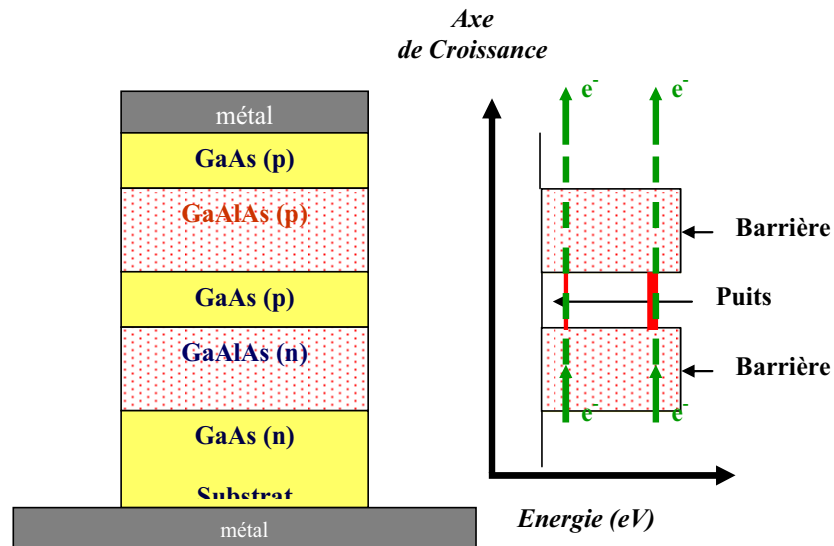


Fig. III.1 (a) : Etats quasi liés dans
une diode Laser à effet tunnel résonant [15]

Les années 90 ont vu l'émergence d'un nombre important de travaux sur les phénomènes de délocalisation dans les systèmes unidimensionnels désordonnés. Faisant suite aux résultats originaux de P. Philips sur la suppression de la localisation d'Anderson dans les chaînes linéaires [15], ces études ont été étendues aux hétérostructures électroniques unidimensionnelles: L'effet dimère brise la symétrie de translation et fournit au système à des énergies particulières un ensemble d'états délocalisés appartenant à de mini bandes permises.

Dans une série de travaux sur les propriétés de transport dans les hétérostructures électroniques désordonnées, Dominguez et al. [16], ont montré les améliorations apportées par la corrélation du désordre à courte portée dans les systèmes binaires [16]. T. Hakobyan [17], A. Parisini [18], I. Gomez [19] et S. Bentata [20] ont étudié numériquement l'influence du désordre corrélé à courte portée sur les propriétés de transport dans les hétérostructures GaAs-Al_xGa_{1-x}As. Afin de distinguer la nature des modes résonants, diverses quantités physiques telles que la conductance, les fluctuations universelles de conductances, la longueur de localisation, la résistance, la distribution de la résistance ont été étudiées statistiquement au moyen du formalisme de la matrice de transfert [16-21]. Malgré la présence aléatoire du motif défaut dimère, la corrélation du désordre à courte portée fournit au système un régime de transmission métallique. Dans ces structures, des états étendus, similaires aux ondes de Bloch apparaissent aussi au voisinage proche des résonances dimère, tandis que des modes de transmission totalement localisés similaires à ceux du désordre binaire non corrélé persistent aux bords des mini-bandes permises [16-21]. Cette approche théorique du phénomène de délocalisation au niveau des hétérostructures désordonnées a été consolidée par l'étude expérimentale de Bellani et al [22].

Dans le même contexte de la localisation d'Anderson, la propagation des ondes électromagnétiques a été également initiée dans les systèmes tridimensionnels par S. John [23]. Depuis le travail original de E. Yablonovitch [24], un grand effort a été également dévoué à l'étude de la manipulation des bandes interdites dans les cristaux photoniques afin de contrôler convenablement la propagation de la lumière dans les dispositifs optoélectroniques [25, 26].

Le phénomène de localisation optique a été examiné en tant que type de diffusion due aux interférences multiples aléatoires. Ces structures ont suscité plus d'intérêts depuis que ces interférences ont montré une attitude constructive face à la diffusion multiple aléatoire, dans des situations de rétrodiffusion cohérente (ou de faible localisation) [27] et de différents cas de corrélations de désordre [28, 29]. En 1987, M. Kohmoto et al ont traité les milieux apériodiques en proposant la séquence de Fibonacci [30]. Par la suite, la propagation de la lumière dans la structure Thue-Morse est venue confirmer la présence de modes de propagation étendus dans les structures particulièrement désordonnées [31].

Motivés par le phénomène de la délocalisation dans les systèmes binaires électroniques par effet dimère, R.W. Peng et al. ont examiné dans des travaux récents, une corrélation interne entre couches diélectriques binaires appartenant à des structures apériodiques, présentant une symétrie miroir. Celle-ci a permis reproduire des résonances similaires aux résonances dimère dans les multicouches binaires Si/ SiO₂ [28]. Dans le même contexte de corrélation de désordre, l'étude a été étendue à la description de la transition de phase localisation-délocalisation des photons dans les systèmes désordonnés. Dans le papier le plus récent de Z. Zhao et al, la transmission des photons a été étudiée aussi bien théoriquement qu'expérimentalement [32]. Des résonances multiples, représentant des modes de transmission étendus sont apparus dans le spectre de transmission des structures n-mer conformément aux prédictions théoriques : Avec la présence de canaux de transmission transparents pour lesquels la distribution de champ électromagnétique est uniforme le long de la structure, des modes similaires aux ondes de Bloch apparaissent dans ces structures particulièrement désordonnées. Une telle manipulation dans le désordre est conforme aux premiers travaux sur les filtres optiques conventionnels à transmission diffusive [33].

La propagation des ondes électromagnétiques dans les milieux aléatoires correspond idéalement au modèle électronique de la localisation d'Anderson, puisque l'interaction photon - photon n'est réellement pas prise en considération [23, 34]. Les modes localisés présentent des fonctions enveloppe exponentiellement décroissantes dans toutes structure unidimensionnelle ne possédant pas de symétrie de translation. Conformément à cette approche de désordre non corrélé, E. Nascimento et al. ont examiné le comportement d'échelle de la transmission dans des systèmes binaires à désordre positionnel aléatoires [35]. A la demi-longueur (et au quart de la longueur) de l'onde optique de Bragg, des modes

étendus similaires aux modes résonants de la commutation binaire dans les systèmes électroniques sont reproduits [41].

Devant une telle analogie entre systèmes optiques et électroniques, nous nous sommes intéressés dans ce travail à l'examen de l'effet dimère dans des films photoniques particulièrement désordonnés. En complément aux récents travaux de Z. Zhao et al [32] et E.N. Nascimento et al. [35], le système binaire considéré est construit sur la base de couches diélectriques différentes reproduisant la condition de Bragg à des longueurs d'ondes particulières. Aussi en présence d'une couche diélectrique séparatrice supplémentaire dans chaque motif, nous optons pour la reproduction d'une structure en puits et barrières optiques similaire à celles des heterostructures électroniques.

Présentant des propriétés diélectriques spatialement modulées, ces structures stratifiées suscitent non seulement un intérêt fondamental dans la description de la propagation des ondes dans les milieux optiques, mais aussi elles nous offrent l'opportunité de maîtriser la propagation des ondes électromagnétiques et de contrôler les réponses de la transmission par l'ajustement convenable des paramètres intrinsèques des cellules élémentaires correspondantes [40].

II. Etude des propriétés de transmission en incidence normale des ondes électromagnétiques dans les films photoniques unidimensionnels aléatoires à désordre binaire corrélé

II.1 Introduction

La propagation des ondes électromagnétiques dans les structures multicouches unidimensionnelles est examinée. Une analogie optique avec le modèle électronique de Kronig-Penney est présentée. Dans l'ordre parfait, la symétrie de translation est conservée par la reproduction périodique des motifs compositionnel et topologique : la constante diélectrique définit le caractère compositionnel du motif tandis que l'épaisseur de la couche décrit son aspect spatial [11]. La reproduction successive des conditions de continuité d'une cellule à une autre permet aussi de décrire les propriétés de transmission de manière totalement récursive [38].

Par ailleurs, l'insertion de couches défauts dans les cristaux photoniques brise la symétrie de translation et détruit en conséquence la structure de bandes. En se référant à la théorie d'échelle de la localisation d'Anderson [34], des modes de transmission localisés apparaissent lorsque le désordre est suffisamment contraignant [32,35]. Aussi, sachant que l'effet dimère [16] modifie les règles de la théorie d'échelle de la localisation dans les systèmes unidimensionnels, nous projetons dans ce travail d'étudier la transition de phase correspondantes (mode localisé – mode délocalisé) dans les systèmes optiques binaires désordonnés. En premier lieu, le modèle du dimère aléatoire est revisité analytiquement de son aspect conventionnel [32] vers une description généralisée.

Conformément au chapitre précédent, l'originalité de ce travail se situe à l'application de la procédure d'alignement des fréquences des résonances caractéristiques sur un canal de transmission commun par ajustement convenable des paramètres intrinsèques des cellules élémentaires hôte et défaut. Comparativement aux approches conventionnelle et généralisée du modèle du dimère aléatoire, les réponses de la transmission sont améliorées. A chaque configuration dimère optimisée, la transition de phase (mode localisé – mode étendu) est décrite, accompagnée du diagramme de phase correspondant aux différents régimes de transmission susceptibles d'apparaître dans chaque mini-bande permise. Une description qualitative des modes de transmission de ces dispositifs optiques particulièrement

désordonnés autour des résonances dimère améliorées est ainsi examinée. Des tableaux récapitulatifs résument l'ensemble des configurations dimère optimisées et identifient les régimes de transmission correspondants.

L'étude de l'ordre parfait constitue le point de départ dans notre travail pour aborder avec sérénité les systèmes binaires dans la cadre du modèle du dimère aléatoire. Une correspondance entre la réponse de la transmission et la relation de dispersion est également donnée en analogie directe avec le modèle électronique de Kronig-Penney (Voir Annexe II.3).

La propagation des ondes électromagnétiques dans les systèmes optiques stratifiés est décrite dans le cadre du formalisme de la matrice de transfert [36-37]. Cette méthode de détermination des réponses de la transmission est simple, élégante et généralisable à n'importe quelle forme du profil du potentiel optique (ou électronique [38], ordonné ou désordonné. (Voir Annexe II.4)

II.2 Etude des systèmes ordonnés en incidence normale

Soit une cellule élémentaire (AB) contenant deux couches diélectriques juxtaposées A et B , homogènes, d'épaisseurs b_A et b_B et de constantes diélectriques respectives ε_A et ε_B . Le milieu de propagation est un film photonique de longueur $L = Nd$ où N est le nombre de périodes et $d = b_A + b_B$ la période du système. Cette structure est incorporée entre le milieu d'incidence ($z < 0$) et le milieu d'émergence ($z > Nd$), semi- infinis, homogènes, identiques à la couche A ($\varepsilon = \varepsilon_A$). La représentation schématique de ce système est montrée sur Fig.III.1(b): Le profil de la modulation diélectrique spatiale $\varepsilon(z)$, apparait en configuration de puits optiques ($\varepsilon(z) = \varepsilon_A$) de largeur b_A et de barrières optiques $\varepsilon(z) = \varepsilon_B$ où $\varepsilon_B > \varepsilon_A$, d'épaisseur b_B régulièrement alternée, semblable à celle du modèle électronique de Kronig-Penney [12].

Dans le cristal photonique, l'existence de modes propres de transmission appartenant aux puits optiques et la présence d'une probabilité de recouvrement non nulle entre modes plus proches voisins, permettent de reconstruire la structure de bandes photonique de la même manière que celle établie dans le modèle électronique des liaisons fortes et des hétérostructures électroniques.

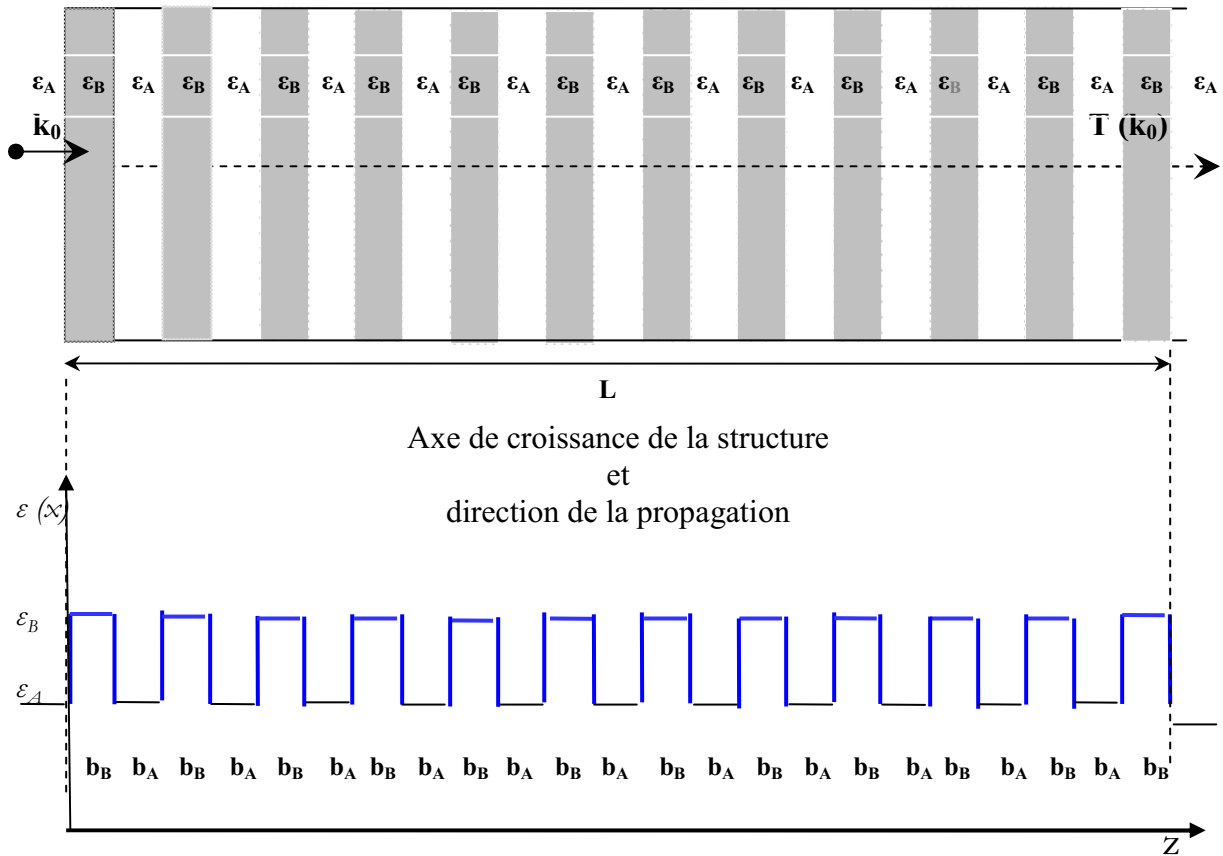


Fig.III 1(b) Représentation géométrique et schématique du profil de potentiel optique dans un cristal photonique dont le motif est analogue à celui de la structure électronique (Fig.III 1(a))

L'objectif principal de cette section consiste à se familiariser avec les différentes approches permettant la description des propriétés de transmission des films photoniques ordonnés. Dans cette démarche purement didactique, les notions de base sont réintroduites en pour illustrer les différentes réponses relatives à l'ordre parfait. Les connections entre les différentes représentations de l'ordre parfait étant ainsi vérifiées, cette partie introductive, acquiert une importance fondamentale du fait qu'elle servira de référence pour l'étude des systèmes binaires désordonnés.

Soit un film photonique constitué d'une période unique, comprenant une couche de constante diélectrique $\varepsilon_A = 1$ et une couche de constante diélectrique $\varepsilon_B \neq 1$. Comme les milieux d'incidence et d'émergence correspondent au vide, cette structure se réduit à un film homogène de constante diélectrique $\varepsilon_B \neq 1$ et d'épaisseur d_B [39]

L'application des conditions de continuité montre que pour cette structure homogène simple barrière optique (B), le coefficient de transmission est décrit par

$$T = \frac{4\epsilon_B}{4\epsilon_B + ((\epsilon_B - 1)^2 \sin^2(\delta_B))} \quad (\text{III.1})$$

où $\delta_B = k_B b_B$ représente la marche optique de l'onde incidente dans la couche diélectrique(B)

Sur une période AB, ce film homogène d'épaisseur b_B et de constante diélectrique ϵ_B (différente de celle du vide) laisse passer 100 % de l'énergie lumineuse à chaque fois que des ondes stationnaires effectives apparaissent dans la couche B.

La condition de la résonance stationnaire

$$\delta_B = m\pi \quad (\text{III.2})$$

(où m est un entier) impose à toute élément B d'épaisseur b_B de présenter une longueur de résonance stationnaire principale:

$$\lambda_B = 2\sqrt{\epsilon_B} b_B \quad (\text{III.3})$$

pour laquelle toute résonance stationnaire secondaire

$$\lambda_{B_m} = \frac{\lambda_B}{m} \quad (\text{III.4})$$

vérifie :

$$T(\lambda_{B_m}) = 1 \quad (\text{III.5})$$

Pour un motif de SiO₂ ($\epsilon_B = 2.25$) d'épaisseur $b_B = 193.3$ nm, et conformément aux Eqs. III.4 et 5, le calcul du coefficient de transmission (à partir du formalisme de la matrice de transfert) donne le mode stationnaire principal à $\lambda_B = 580nm$ et secondaire à $\lambda_{B_2} = 290nm$ respectivement (voir Fig. III.2 (a) et (b)).

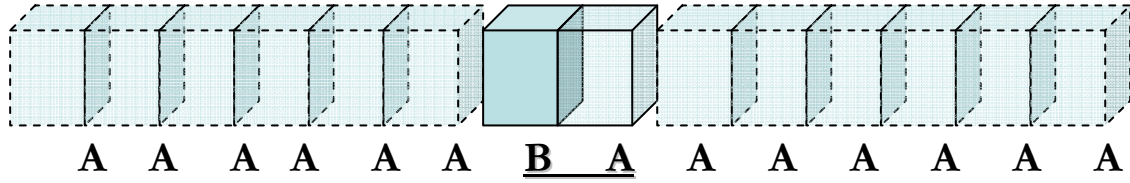


Fig. III.2 (a) Cellule élémentaire AB insérée entre les milieux d'incidence et d'émergence (A)

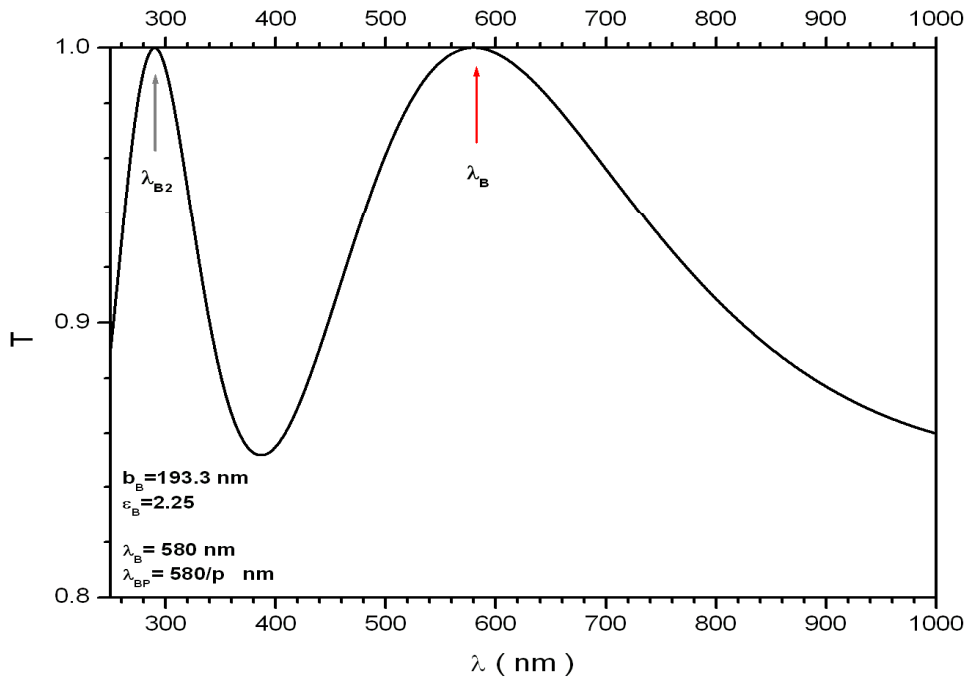


Fig. III.2 (b) Apparition des modes stationnaires principal $\lambda_B = 580 \text{ nm}$ et secondaire $\lambda_{B2} = 290 \text{ nm}$ dans la cellule (AB) conformément à la disposition définie sur Fig. III.2 (a)

Pour un système plus long, la transmission d'un assemblage progressif de plusieurs périodes ($N = 1, 2, 3, 10$ et 40) est représentée sur Fig. III.3 (a) et (b). Dans cette structure, une couche séparatrice de vide ($\epsilon_A = 1$) d'épaisseur $d_A = 250 \text{ nm}$ est considérée pour compléter la cellule élémentaire du cristal phonique AB.

Le profil de transmission d'une structure double ($N=2$) et triple ($N=3$) périodes montre respectivement l'apparition d'un (1) et de deux (2) modes résonants supplémentaires. Lorsque le nombre de périodes est suffisamment grand, les modes résonants se disposent les uns à côté des autres dans le spectre de transmission, jusqu'à former des domaines de modes totalement transparents ($T = 1$) alternées par des bandes parfaitement réfléchissantes ($T = 0$).

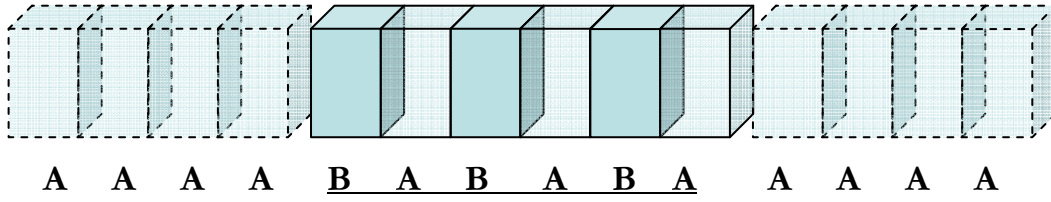


Fig. III.3(a) Film photonique à 3 périodes AB inséré entre les milieux d'incidence et d'émergence (A)

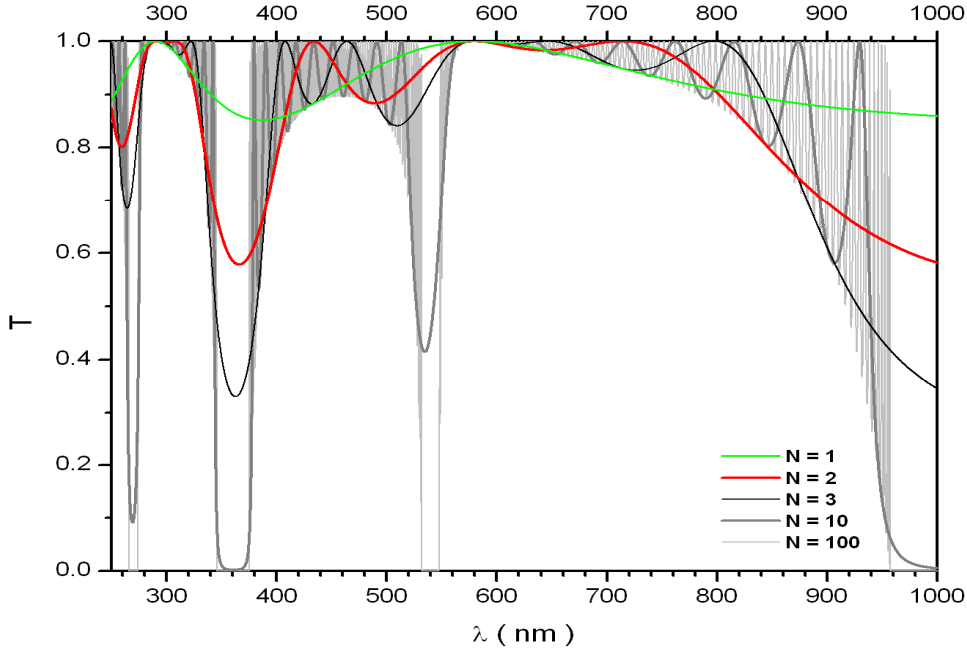


Fig. III 3 (b). Profil de transmission pour plusieurs périodes $N=1, 2, 3, 10$ et 100 conformément à la disposition définie sur Fig. III.3 (a). La cellule élémentaire est définie par les paramètres $\epsilon_A = 1$, $d_A = 250$ nm et $\epsilon_B = 2.25$, $b_B = 193.3$ nm.

Dans chaque bande transparente, les modes résonants s'organisent différemment en fonction de l'appartenance du mode stationnaire λ_{Bm} à celle-ci : En règle générale, pour un système de N périodes, $N-1$ modes résonants vérifiant :

$$\kappa_{AB}(\lambda_{hn}) = \cos\left(\frac{n}{N}\pi\right) \Big|_{n=1, N-1} \quad (\text{III.6})$$

apparaissent dans chaque bande transparente de forme symétrique. (La fonction $\kappa_{AB}(\lambda)$ étant la relation du modèle de Kronig-Penney à profil rectangulaire (voir Appendice II.) et l'indice h référant au caractère hôte du motif). Quant aux bandes de forme asymétrique, il faut aussi comptabiliser le mode stationnaire $\lambda_{Bm} = \frac{\lambda_B}{m} = \frac{580}{m}$ (nm) qui y appartient. Sur le spectre de

transmission, ce mode stationnaire est d'une particularité intéressante du fait que dans chaque bande asymétrique, c'est le seul mode de transmission préservant la transparence du système, progressivement d'une période à une autre : A cette longueur d'onde particulière, le système présente une transparence totale indépendamment de la période N du cristal photonique (voir Fig. III.3 (b)). Cette résonance est équivalente à la résonance libre f_0 introduite par le ressort dans la corde vibrante chargée en masses (Equ. II.14). En effet, avec l'absence effective de diffuseurs à cette fréquence particulière ($\lambda_n(f_0)_{n=1,N} = 0$), le système mécanique reste totalement transparent indépendamment de la taille du système.

Par ailleurs, considérer l'ordre dans les systèmes optiques consiste aussi à identifier les relations de dispersion correspondantes. En se basant sur le formalisme de la matrice de transfert (voir Appendice II), la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney optique est déterminée à partir de

$$\kappa_{AB}(\lambda) = \frac{1}{2} \text{Tr} [T(N=1)]_{AB} \quad (\text{III.7})$$

où $T(N=1)_{AB}$ est la matrice de transfert de la cellule élémentaire (AB). Aussi sachant que chaque couche du motif élémentaire est caractérisée par un vecteur d'onde parallèle

$k_i = \sqrt{\epsilon_i} \frac{2\pi}{\lambda}$ (où $i = A, B$), la relation de dispersion $K_{AB}(\lambda)$ est obtenue à partir de :

$$K_{AB}(\lambda) = \frac{1}{d} \arccos(\kappa_{AB}(\lambda)) \quad (\text{III.8})$$

Celle-ci permet de déterminer le vecteur d'onde K_{AB} relatif à la cellule élémentaire AB de période d , de la même manière que dans le cas des chaînes linéaires.

Les bandes transparentes vérifiant $|\kappa_{AB}(\lambda)| < 1$ représentent des modes de transmission ayant des vecteurs d'ondes K_{AB} réels, synonymes d'ondes permises propagatrices aussi bien dans le sens croissant que décroissant des positions alors que les bandes totalement réfléchissantes (correspondant à des vecteurs d'onde purement imaginaires) décrivent des modes de transmission appartenant aux bandes interdites.

Toutes ces correspondances entre profil de transmission, relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney et relation de dispersion de la structure de bandes sont représentées sur Fig. III.4. Un parfait accord est enregistré entre les trois différentes représentations

concernant les domaines de fréquences relatifs aux bandes transparentes ($T=1$) (bandes réfléchissantes ($T=0$)), les vecteurs d'onde permis (interdits) et l'établissement de la condition $|\kappa_{AB}(\lambda)| < 1$ ($|\kappa_{AB}(\lambda)| > 1$).

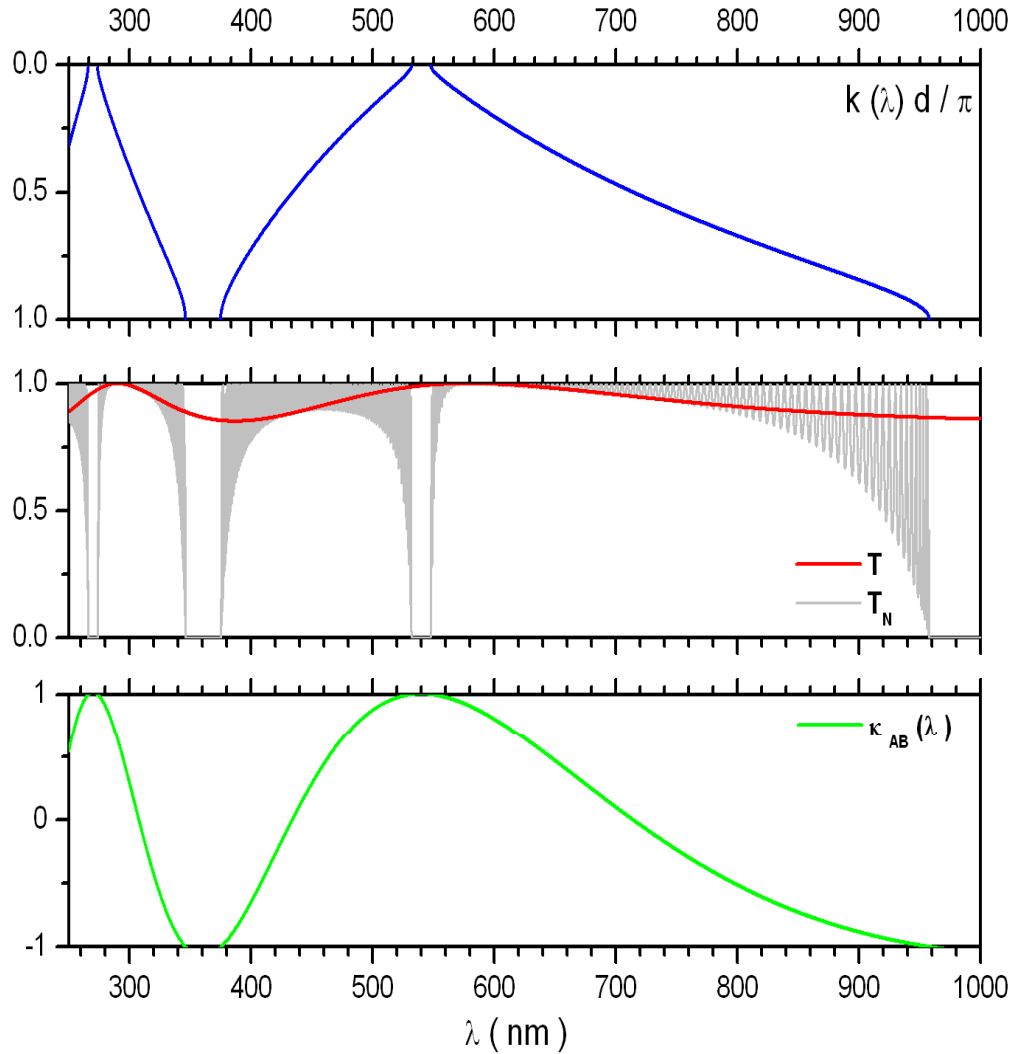


Fig. III 4 Correspondances entre les différentes représentations de l'ordre parfait : structure de bandes, profil de transmission, équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney.

Une dernière remarque importante consiste à signaler que seul le profil de la transmission $T(N)$ distingue explicitement les modes stationnaires $\lambda_{B_n} = \frac{580}{n}$. Chaque mode stationnaire présente à un minimum de fluctuations du coefficient de transmission dans la bande permise.

II. 3 Etude des systèmes binaires désordonnés

La partie précédente a permis de définir les paramètres caractéristiques de la cellule élémentaire permettant de décrire les propriétés de transmission dans un cristal photonique. Dans cette section, nous allons étudier les systèmes binaires pour lesquels deux motifs sont considérés. Nous nous intéresserons en particulier aux désordres binaires non corrélé et corrélé (voir Fig. III.5) pour lesquels, les réponses moyennes caractéristiques de la transmission $\langle T \rangle$ et de la longueur de localisation $\langle \xi \rangle$ (déterminée à partir du coefficient de Lyapunov réduit $\langle \frac{L}{\xi} \rangle$ où L est la taille du système) sont examinées.

Dans une première partie, nous commencerons par décrire le modèle conventionnel du dimère aléatoire dans les systèmes optiques stratifiés désordonnés. Une généralisation de ce modèle est ensuite présentée pour mettre en évidence la présence d'une résonance supplémentaire dans ces systèmes binaires. Une optimisation des ces réponses de transmission est donnée en dernière partie à partir de l'introduction de la procédure de l'alignement des résonances caractéristiques. Cette approche est similaire à celle utilisée dans le chapitre précédent.

a- Le désordre binaire conventionnel

Considérons un cristal photonique de longueur $L = Nd$, défini par la cellule hôte (AB) dont les paramètres sont $\varepsilon_A = 1$, $b_A = 250 \text{ nm}$ et $\varepsilon_B (\text{SiO}_2) = 2.25$, $b_B = 193.3 \text{ nm}$ (la cellule B, étudiée précédemment). L'ordre de ce système est perturbé par le remplacement la couche B (SiO_2) par une couche C (GaAs) dont les caractéristiques sont $\varepsilon_c = 13.00$ et $b_c = 75 \text{ nm}$. Un fort contraste dans le désordre compositionnel est nécessaire pour un bonne description de l'effet dimère. Les distributions binaires (relatives aux désordres spatial et compositionnel non corrélés) sont respectivement définies par les fonctions de distribution suivantes :

$$\begin{cases} P(b) = c_B \delta(b - b_B) + c_C \delta(b - b_C) \\ P(\varepsilon) = c_B \delta(\varepsilon - \varepsilon_B) + c_C \delta(\varepsilon - \varepsilon_C) \end{cases} \quad (\text{III.9})$$

où c_C et $c_B = 1 - c_C$ définissent les concentrations des éléments défaut et hôte respectivement. Par ailleurs le modèle du dimère aléatoire est obtenu en disposant aléatoirement les motifs défaut par paires le long de la structure (voir Fig. III. 5)

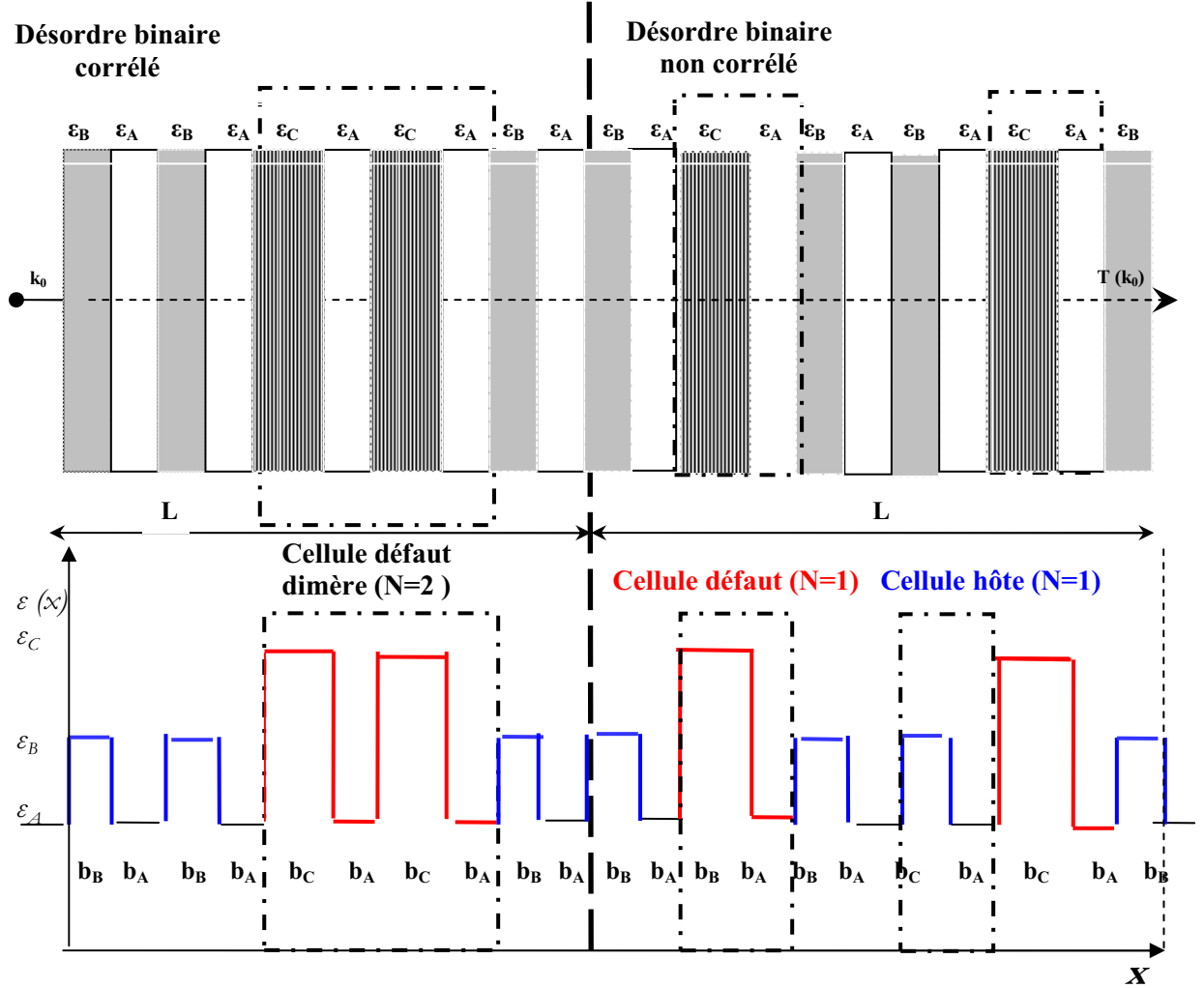


Fig. III. 5 Configuration des désordres binaires corrélé (modèle du dimère aléatoire) et non corrélé.

Les réponses de la transmission du système binaire désordonné, correspondant à la $c_B = 0.40$ et $N = 1000$ séquences (ou périodes) sont représentées sur Fig.III.6(a) (en noir). Nous constatons que ce taux de désordre est suffisamment contraignant pour rendre le milieu de propagation quasiment réfléchissant à toute onde incidente dont la longueur d'onde appartient au domaine des fréquences considéré : Conformément à la théorie d'échelle de la localisation (chapitre 1), $\langle T \rangle \approx 0$ est une signature évidente de la présence de la localisation d'Anderson dans ces systèmes optiques stratifiés.

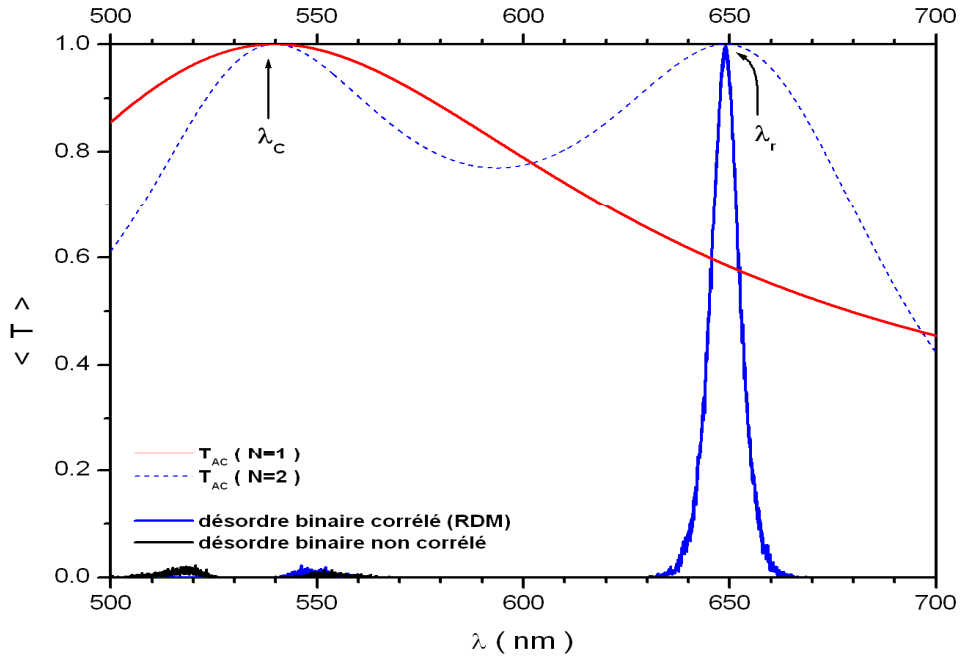


Fig. III 6(a) Apparition de la résonance dimère à $\lambda_r = 649nm$ conformément à la condition de transparence du motif dimère défaut. Le désordre corrélé obéît au phénomène de localisation ($\langle T \rangle = 0$) induit par le désordre binaire $N = 1000$ et $c_B = 0.40$.

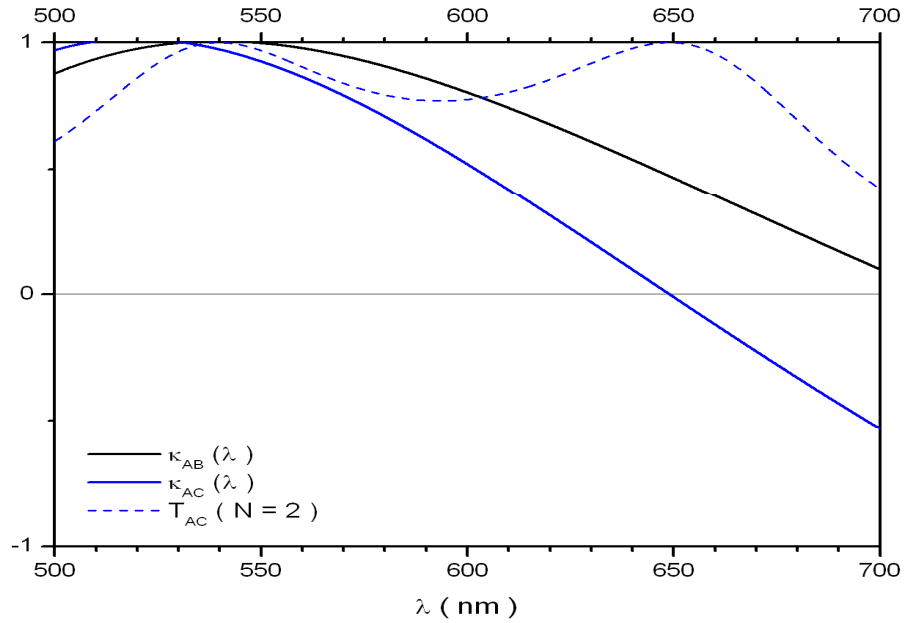


Fig. III 6(b) Accord entre la condition de résonance conventionnelle ($\kappa_{AC}(\lambda_r) = 0$) et la transparence du motif dimère défaut ($T_{AC}(\lambda_r)_{N=2} = 0$)

Par ailleurs, la présence de la corrélation de désordre à courte portée sous forme d'un motif dimère ressuscite les modes de transmission autour de la longueur d'onde $\lambda_r = 649nm$ (courbe en bleu sur Fig. III.6(a)). Cette fréquence qui n'est autre que la fréquence de transparence du motif dimère ($T_{AC}(\lambda_r)|_{N=2} = 1$) (courbe en pointillé bleu sur Fig. III 6(b)), correspond à la fréquence caractéristique du modèle de Kronig- Penney :

$$\kappa_{AC}(\lambda_r) = 0 \quad (III.10)$$

en parfait accord avec le modèle conventionnel de l'effet dimère électronique à profil rectangulaire [16,41]. Rappelons que dans un cristal photonique, la formule de Poincaré permet aussi de décrire la matrice de passage de l'onde d'une période à une autre (Eq.A.II.67). Sur deux périodes consécutives correspondant au motif défaut dimère,

$$\begin{pmatrix} f_{N+2} \\ f_{N+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\kappa_{AC}(\lambda) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} f_N \\ f_{N-1} \end{pmatrix} \quad (III.11)$$

A la résonance ($\kappa_{AC}(\lambda_r) = 0$), la matrice de passage P_d du motif défaut dimère devient :

$$P_d = \begin{pmatrix} 2\kappa_{AC}(\lambda_r) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = -I \quad (III.12)$$

où I est la matrice identité. Face à cette condition de la transparence de la paire de défauts (similaire a celle obtenue dans le cas de distribution de Dirac), le milieu désordonné devient équivalent à un système ordonné. La condition conventionnelle de l'effet dimère, dans les systèmes stratifiés , dictée par :

$$\kappa_{AC}(\lambda_r) = 0 \quad \text{et} \quad |\kappa_{AB}(\lambda_r)| < 1 \quad (III.13)$$

est à l'origine de l'apparition d'une singularité importante dans les réponses du coefficient de Lyapunov réduit à $\lambda_r = 649nm$, synonyme d'un état étendu dans le spectre de transmission (Fig. III 6 (c)): Une comparaison entre longueurs de localisation correspondants aux cas des désordres binaires corrélé (c) et non corrélé (nc) montre que $\xi_c(\lambda_r) = 10^5 \xi_{nc}(\lambda_r)$. Une

transition de phase (mode localisé - mode étendu) conforme aux prédictions conventionnelles de l'effet dimère électronique est ainsi obtenue [16,41]

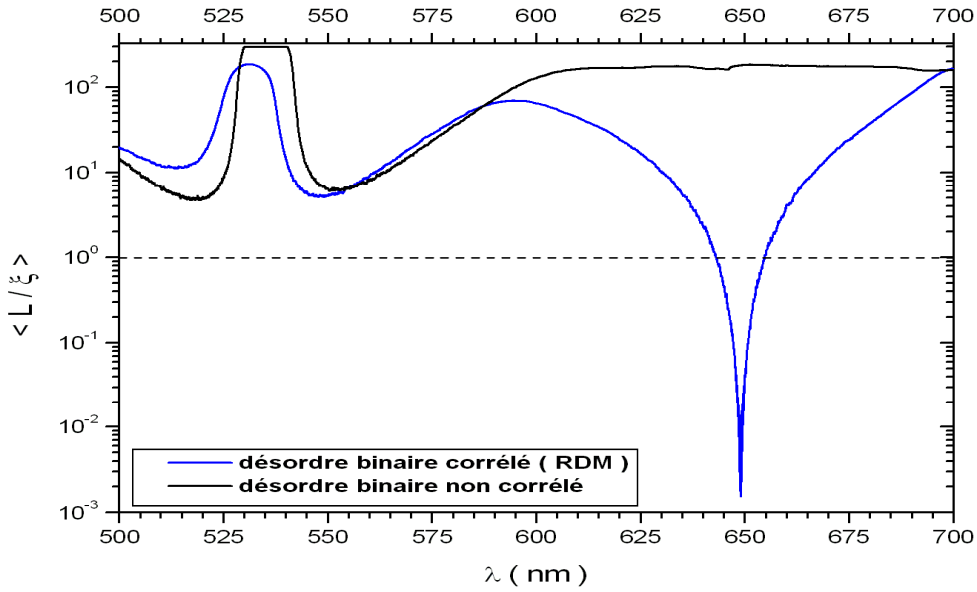


Fig. III 6(c) Apparition d'un mode étendu à la résonance dimère ($\lambda_r = 649\text{nm}$)

La nature du mode résonant est décrite à partir de la détermination du comportement de la fonction enveloppe correspondante sur Fig.III.6. Le coefficient de transmission $\langle T(N) \rangle$ en fonction du nombre de séquences N , montre que le mode résonant possède une fonction enveloppe périodique à amplitude uniforme.

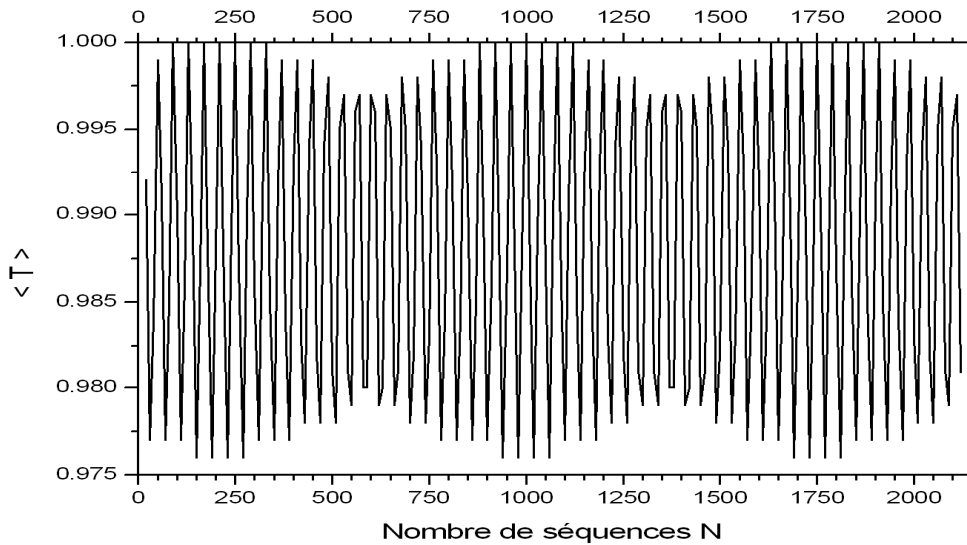


Fig. III 6(d) Comportement périodique à amplitude uniforme de la fonction enveloppe à la résonance dimère ($\lambda_r = 649\text{nm}$)

Avec la transparence des défauts à la résonance dimère, le milieu désordonné se réorganise et devient effectivement ordonné. Une période $d_{eff} = 750 d$ est enregistrée sur la fonction enveloppe. Des modes de transmission similaires aux modes de Bloch dans un ordre parfait, apparaissent dans ces structures désordonnées [41].

b- Le désordre binaire généralisé

Dans le modèle conventionnel du dimère aléatoire, tel introduit dans les systèmes électroniques (et vu précédemment), la localisation d'Anderson est supprimée à chaque situation de transparence du motif défaut dimère [16, 41].

Or, sur la Fig.III.6(a) représentant la réponse de la transmission de la configuration dimère conventionnelle, seule une résonance apparaît ($\lambda_r = 649nm$) bien que le motif défaut dimère est autant transparent au mode stationnaire principal ($T_{AC}(\lambda_C)|_{N=2} = 1$) qu'à la fréquence propre au défaut dimère ($T_{AC}(\lambda_r)|_{N=2} = 1$). En consultant les relations de dispersion des motifs (AB) et (AC) sur Fig. III.6(b), il y apparaît clairement que $\lambda_C = 540nm$ se situe dans la bande interdite du réseau hôte ($|\kappa_{AB}(\lambda_C)| > 1$).

Pour lever cette incompatibilité entre le mode transparent du défaut dimère et le canal hôte interdit, une manipulation sur le réseau hôte (si l'on veut préserver les canaux de transmission du défaut dimère) devient nécessaire. Ainsi par ajustement des paramètres intrinsèques du motif hôte, il devient possible de translater la résonance stationnaire principale λ_C vers la bande permise du réseau hôte. Aussi, vu les propriétés de la transmission parfaite des ondes stationnaires susceptibles d'apparaître dans le cristal photonique (Fig. III.3), la contrainte supplémentaire:

$$\lambda_C \equiv \lambda_B \tag{III.13}$$

est imposée aux deux monocouches diélectriques B et C. Sachant que la longueur d'onde de la résonance principale est donnée par $\lambda_B = 2\sqrt{\epsilon_B}b_B$, faire coïncider les deux résonances stationnaires principales sur une longueur d'onde commune correspond à une couche diélectrique (B) dont l'épaisseur est donnée par :

$$b_B = \frac{\lambda_C}{2\sqrt{\epsilon_B}} = 180 \text{ nm} \quad (\text{III.14})$$

La transmission des systèmes binaires correspondants est examinée sur la base des relations de dispersion $\kappa_{AB}(\lambda)$ et $\kappa_{AC}(\lambda)$. Telles représentées sur la Fig. III.7(a), il devient possible de vérifier que les résonances λ_C et λ_r appartiennent effectivement au domaine des fréquences relatif à la bande permise de la structure hôte. Or contrairement au cas conventionnel (Fig. III. 6(a)), un pic de transmission unité supplémentaire apparaît sur le spectre de transmission du désordre binaire non corrélé (en vert sur Fig. III.7(a)). Cette résonance qui correspond à la contrainte de l'alignement des modes stationnaires principales ($\lambda_B = \lambda_C$) reproduit une situation d'indiscernabilité entre les deux couches B et C, bien que celles-ci soient de natures et d'épaisseurs différentes ($\epsilon_B \neq \epsilon_C$ et $b_B \neq b_C$). Ceci équivaut à la condition de la commutation balistique décrite précédemment dans le systèmes mécanique masse-ressort équivalent (Eq. II. 23)

Dans ces conditions de la similitude de transparence des couches B et C ($T_{AB}(\lambda_B) = 1$ et $T_{AC}(\lambda_C) = 1$), l'égalité $\kappa_{AB}(\lambda) = \kappa_{AC}(\lambda)$ identifiée sur Fig. III.7(a), fournit des matrices de passage identiques :

$$P_{AC} = P_{AB} \quad (\text{III.14})$$

Procéder à toute permutation entre les motifs AB et AC ne peut apporter de perturbations au système du fait qu'à cette résonance, une situation d'ordre déterministe est réalisée sur l'ensemble de la structure. Ceci explique clairement la raison pour laquelle cette résonance est préservée à $\lambda_r = 649\text{nm}$ dans le cas de la corrélation du désordre à courte portée (représenté en rouge sur Fig. III 7(b)).

Devant une telle diversité de types de résonances, les pics de transmission unité apparaissent dans le modèle du dimère aléatoire en réponses soit à une situation de transparence totale de la paire de défaut ou bien à une condition d'indiscernabilité entre motifs hôte et défaut.

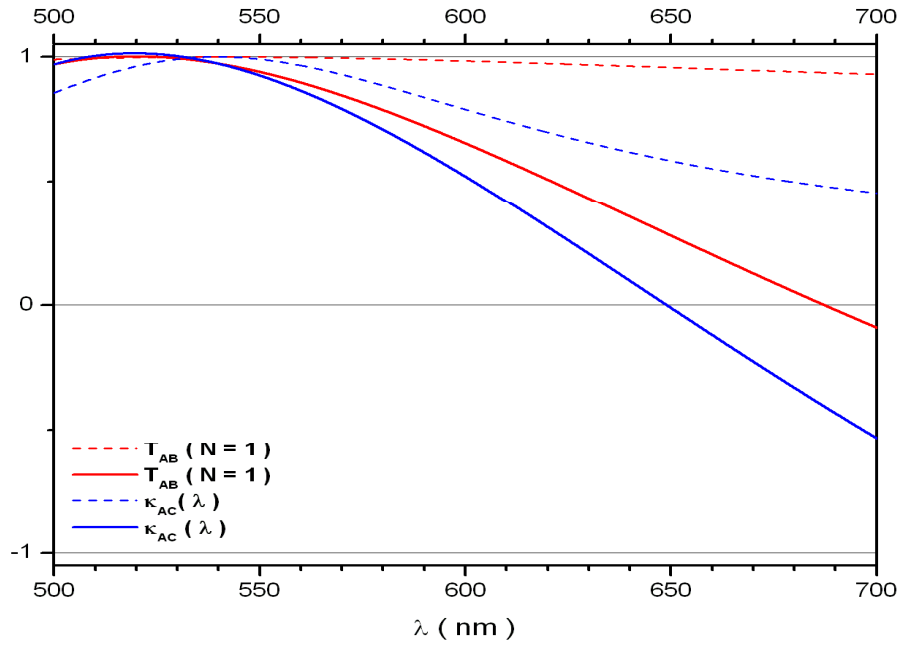


Fig. III.7(a) Alignement des résonances principales hôte et défaut sur $\lambda_C = 540nm$

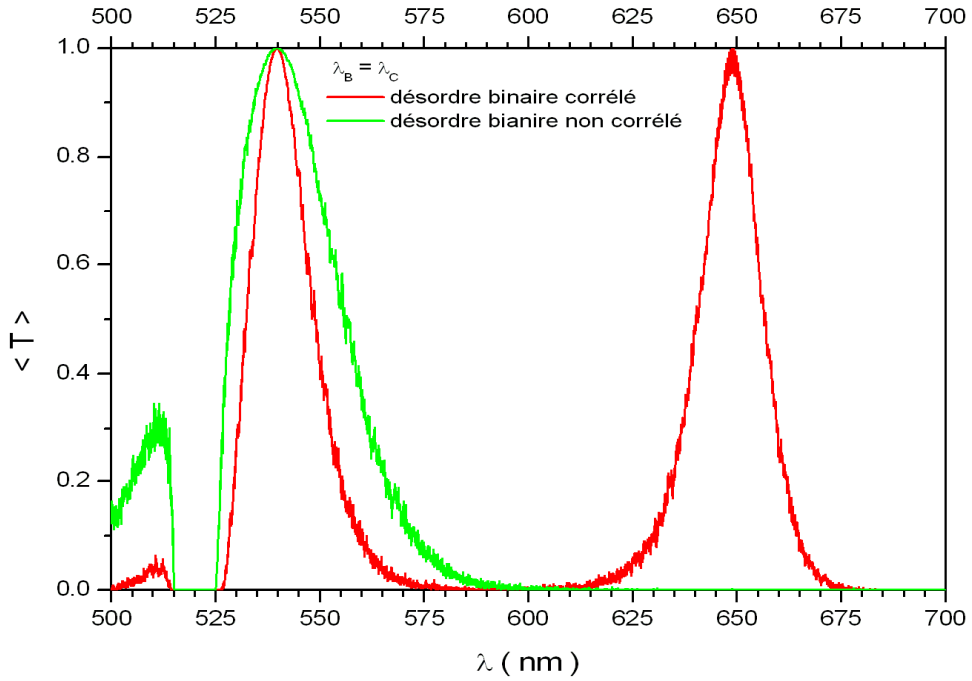


Fig. III 7(b) Résonances de commutation ($\lambda_C = 540nm$) et de transparence du défaut dimère ($\lambda_C = 649nm$) dans le modèle du dimère aléatoire généralisé.

En se basant sur le raisonnement de Wu et al. tel que repris par X. Huang et al. dans le cadre du modèle électronique des liaisons fortes et appliqué à l'étude des chaînes linéaires désordonnées (Eq. I. 23), et conformément à la procédure établie sur les systèmes mécaniques (Eq. II.20), la détermination des conditions analytiques générales de la résonance dans les systèmes binaires à distribution de Dirac, peut être étendue aux heterostructures optiques désordonnées dans le modèle de Kronig-Penney: La matrice de passage relative à un motif dimère peut s'écrire sur une base constituée des deux matrices représentant l'indiscernabilité des cellules défaut et hôte et la transparence totale du motif :

$$\begin{pmatrix} 2\kappa_{AC}(\lambda) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = \eta_1 \begin{pmatrix} 2\kappa_{AB}(\lambda) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \eta_2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{III.15})$$

où η_1 et η_2 sont deux constants réelles. Dépendant explicitement de la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney des motifs défaut et hôte, l'équation caractéristique des résonances dans l'effet dimère généralisé est décrite par

$$\kappa_{AC}(\lambda)(\kappa_{AC}(\lambda) - \kappa_{AB}(\lambda)) = 0 \quad (\text{III.16})$$

La résolution graphique de cette équation est présentée sur la Fig. III 7(a). Les résonances obtenues coïncident parfaitement avec les pics de transmission unité dans le profil de la transmission moyenne, aussi bien dans le cas du désordre binaire non corrélé que celui de motif dimère aléatoire (Fig. III 7(b)). Aussi avec l'apparition de singularités importantes sur le comportement du coefficient de Lyapunov (Fig. III 7(c)), le caractère étendu de ces modes est ainsi démontré. Néanmoins, il est à remarquer que la résonance de l'indiscernabilité des motifs ($\lambda_c = 540nm$) - qui reproduit une situation d'un ordre parfait - semble présenter une mode de transmission plus délocalisé que celui de la résonance dimère

$$(\langle \frac{L}{\xi(\lambda_c)} \rangle \approx 10^{-7} \text{ et } \langle \frac{L}{\xi(\lambda_r)} \rangle \approx 10^{-3}).$$

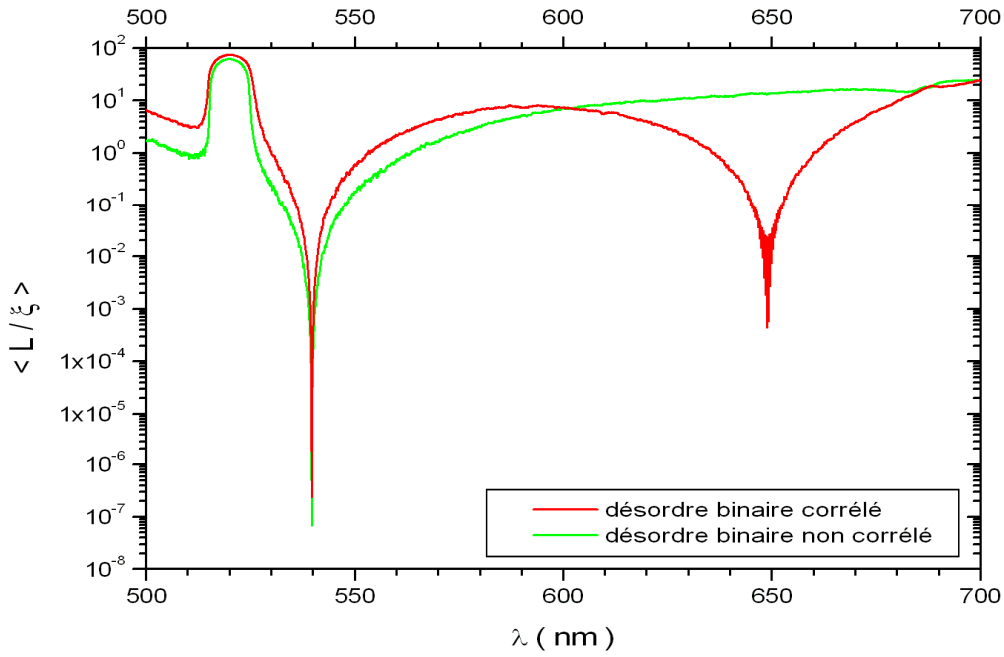


Fig. III 7(c) Singularités des coefficients de Lyapunov réduit à la résonance de commutation ($\lambda_c = 540\text{nm}$) et à la résonance de transparence du défaut dimère ($\lambda_c = 649\text{nm}$) dans le modèle du dimère aléatoire généralisé.

Dans le but d'identifier le type de ce mode de transmission, la nature des modes résonants est examinée en comparaisons avec celle de la résonance dimère conventionnelle (Fig. III. 8(a)).

Nature des modes de transmission résonants

L'étude précédente a démontré qu'en fonction des paramètres structuraux des motifs défaut et hôte, deux résonances peuvent apparaître dans le profil de transmission des systèmes binaires corrélés à courte portée. La nature de chaque mode résonant est décrite à partir du comportement des fonctions enveloppes correspondantes. La transmission moyenne $\langle T(N, \lambda) \rangle$ est examinée en fonction de la longueur du système (donnée en nombre de séquences N) à la longueur d'onde λ appartenant à chaque mini-bande permise.

Sur la Fig. III.8(a), un mode de transmission similaire au mode de Bloch apparaît à la résonance $\lambda_r = \lambda_{d2} = 649\text{nm}$ en parfait accord avec la considération conventionnelle de l'effet dimère (Eq. III.16) : Avec la transparence du motif défaut dimère (d'où l'indice d pour

défaut et 2 pour $N = 2$ périodes), le régime de transmission est diffusif, reproduisant ainsi une périodicité équivalente à celle d'un ordre parfait. Dans ce cas, la fonction enveloppe apparaît sous une forme périodique à amplitude uniforme le long de toute la structure.

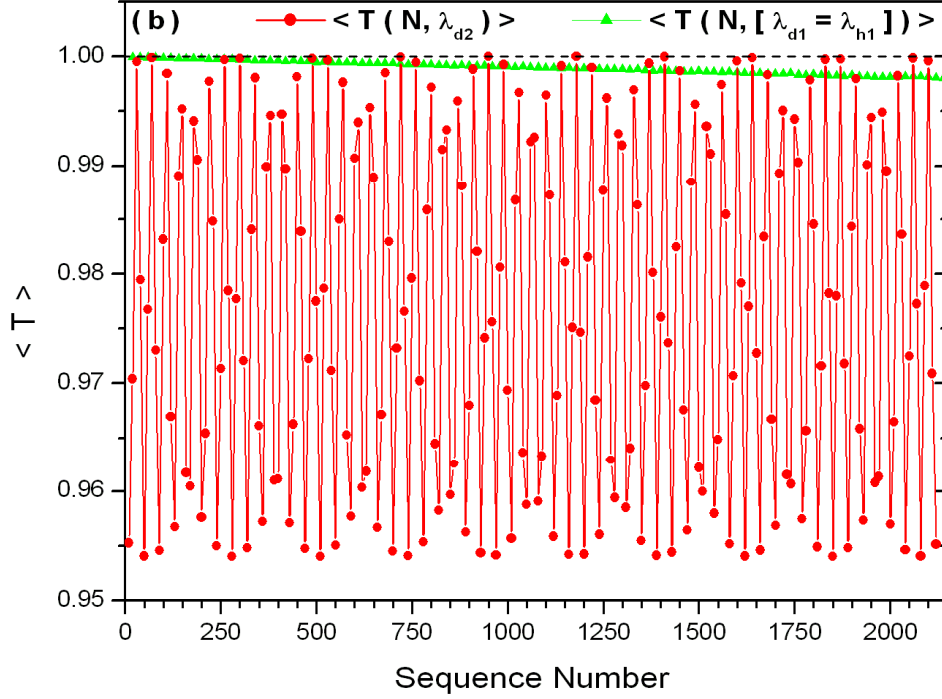


FIG. III 8(a) Comparaison entre les fonctions enveloppes des modes résonants à

$$\lambda_{d2} = \lambda_r = 649nm \text{ et à } \lambda_B = \lambda_C = 540 \text{ nm}$$

Par ailleurs, bien que les couches B et C soient identiquement transparentes à $\lambda_B = \lambda_C$ (avec $\lambda_B \equiv \lambda_{h1}$ et $\lambda_C \equiv \lambda_{d1}$ où les indices h et d indiquent les types hôte et défaut des motifs, tandis que l'indice 1 le nombre de périodes), la nature de ce mode résonant est fondamentalement différent de celle du cas précédent : Présentant une allure linéaire, faiblement décroissante le long de la structure, un régime de transmission quasi balistique est obtenu [42].

Afin de mieux décrire ces modes résonances, nous nous sommes intéressées à l'examen du diagramme de phase relatif aux différents régimes de transmission pouvant apparaître lors de la transition de phase (mode localisé – mode étendu) autour des ces pics de transmission. Les fonctions enveloppes $\langle T(N, \lambda) \rangle$ sont décrites à la longueur d'onde $\lambda = \lambda_r - \Delta\lambda$ où $\Delta\lambda$ représente la longueur d'onde de déviation par rapport de la résonance.

Sur la Figure. III.8(b), nous constatons que le caractère diffusif de la résonance dimère ($\lambda_r = 649\text{nm}$) disparaît à $\Delta\lambda = 2\text{nm}$. Un régime intermédiaire s'installe jusqu'à $\Delta\lambda = 6\text{nm}$. Au-delà de cette valeur, des modes de transmission de plus en plus localisés apparaissent. (Fig. III 8(b))

Quant à la résonance d'indiscernabilité identifiée à $\lambda = 540\text{ nm}$ (connue aussi sous le nom de résonance de commutation conventionnelle dans les superréseaux électroniques [14,19,20]), une signature quasi balistique lui est affiliée jusqu'à $\Delta\lambda = 3\text{nm}$. Au delà de $\Delta\lambda = 5\text{nm}$, la longueur de localisation devient comparable avec la taille du système et permet à la localisation d'Anderson de s'installer : $\langle T(N) \rangle \propto e^{-\frac{N}{\xi}}$ où ξ est la longueur de localisation. (Voir Fig. III 8(c)).

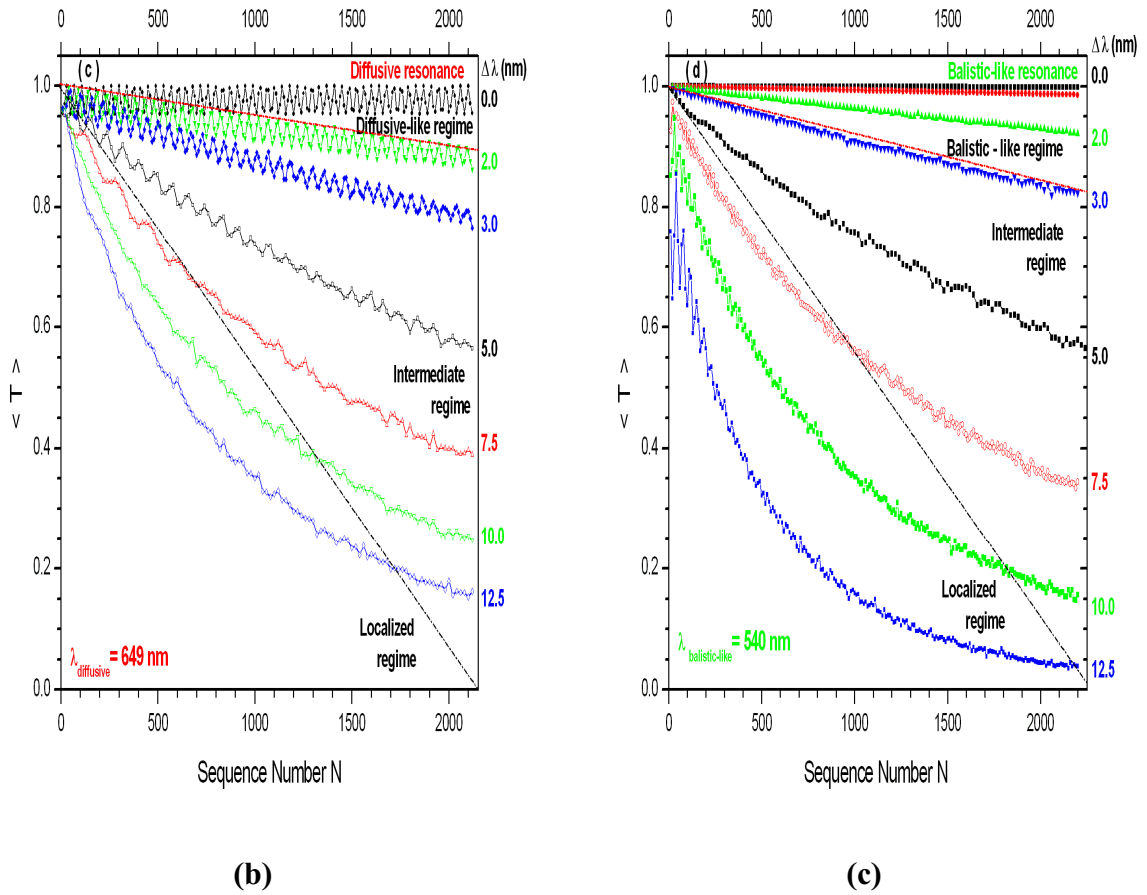


FIG. III.8 Comparaison entre les régimes de transmission à la résonance dimère diffusive (b) et la résonance de commutation quasi balistique (c)

Ce raisonnement sur les diagrammes de phase est construit autour des deux droites superposées aux profils des fonctions enveloppes. La droite inférieure (qui apparaît en pointillé, (couleur noir) correspond à la tangente du régime critique de la localisation pour lequel $\frac{L}{\xi} = 1$ (sur ces figure $L = 2150 d$). Par ailleurs, la droite supérieure proche du régime de la résonance est un guide pour l'observateur. Cette droite à pour rôle de déterminer le comportement limite de la décroissance linéaire du régime quasi balistique. Un régime intermédiaire constitué de modes délocalisés ($\frac{L}{\xi} < 1$) mais pas suffisamment étendus est identifié entre ces deux droites caractéristiques.

II.4 Optimisation de la configuration dimère généralisée

Dans cette partie, nous revisitons la configuration dimère en imposant la contrainte supplémentaire de l'alignement de canaux de transmission résonant disponibles (à savoir la résonance stationnaire principale et la résonance dimère) de motifs hôte et défaut sur des longueurs d'onde commune.

L'objectif de cette section, consiste à décrire les effets d'une telle manipulation sur les propriétés de transmission conventionnelles et de présenter des configurations intéressantes, susceptibles d'améliorer et d'optimiser les réponses de transmission dans ces dispositifs optiques désordonnés.

a -Alignement sur la résonance défaut dimère

Une première configuration proposée, consiste à procéder à la translation de la résonance stationnaire hôte de $\lambda_{h1} = \lambda_B = 540nm$ vers la résonance dimère λ_{d2} tel que

$$\lambda_{h1} \equiv \lambda_{d2} = 649 \text{ nm} \quad (\text{III.17})$$

En ajustant convenablement les paramètres de la cellule hôte, cette contrainte est vérifiée lorsque la couche diélectrique B dispose d'une épaisseur :

$$b_B = \frac{\lambda_{d2}}{2\sqrt{\epsilon_B}} = 216 \text{ nm} \quad (\text{III.18})$$

Ceci est en accord avec les profils de transmissions des cellules individuelles AB et AC telles qu'indiquées sur Fig. III.9(b). $b_c = 250\text{nm}$ reste inchangée. Le paramètre N indique le nombre de périodes correspondant à chaque motif.

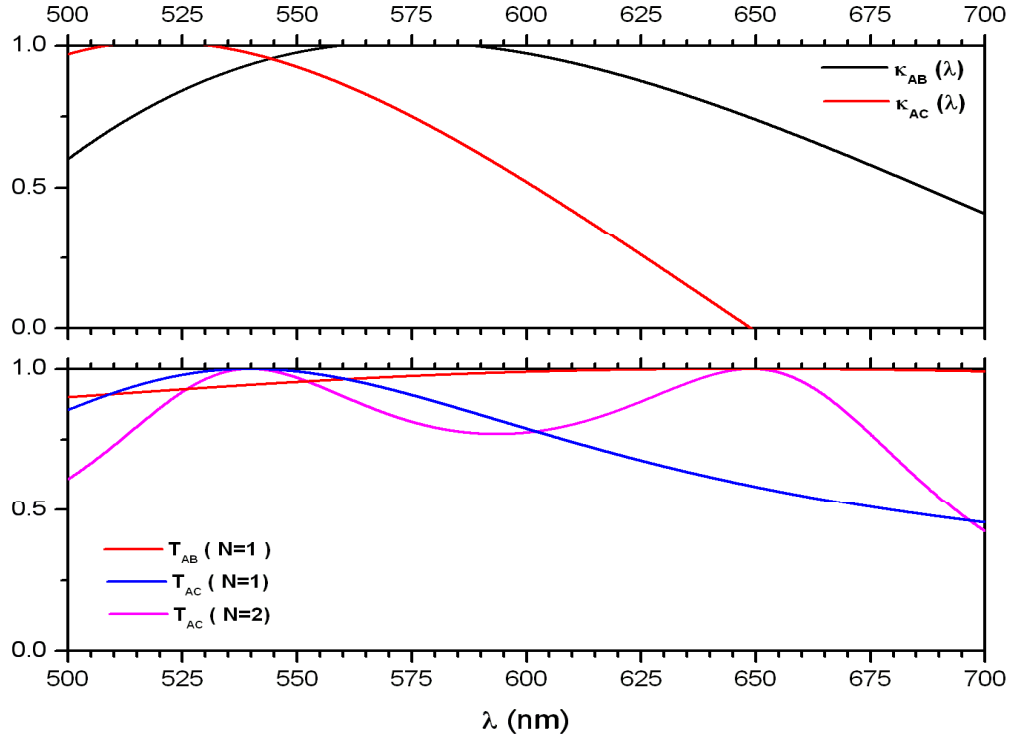


Fig. III 9 (a) Vérification de la contrainte d'alignement des résonances $\lambda_{h1} \equiv \lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$

Dans le cas de la configuration du désordre binaire correspondant à ces paramètres ajustés ($b_B = 216 \text{ nm}$), les réponses de la transmission et de la longueur de localisation moyennes sont représentées sur Fig. III.9(b) et Fig. III.9(c) respectivement. En comparaison avec le modèle binaire généralisé étudié précédemment, la transmission montre l'existence d'un seul pic résonant. Situé à la longueur d'onde $\lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$, celui-ci est en parfait accord avec la prédiction conventionnelle de l'effet dimère ($\kappa_{AC}(\lambda_{d2}) = 0$) (voir Fig. III 9(a)). Cependant, présentant des fluctuations dans le coefficient de transmission $\langle T(\lambda) \rangle$, proches de celles de la résonance quasi balistique précédente, cette résonance dimère semble être similaire à la résonance de commutation. Aussi, disposant d'un mode de transmission plus délocalisé ($\langle \frac{L}{\xi(\lambda_{d2})} \rangle \approx 10^{-6}$) que celui de la résonance dimère diffusive

conventionnelle ($\langle \frac{L}{\xi(\lambda_{d2})} \rangle \approx 10^{-4}$), cette résonance dimère (conventionnellement
diffusive) semble présenter un comportement balistique.

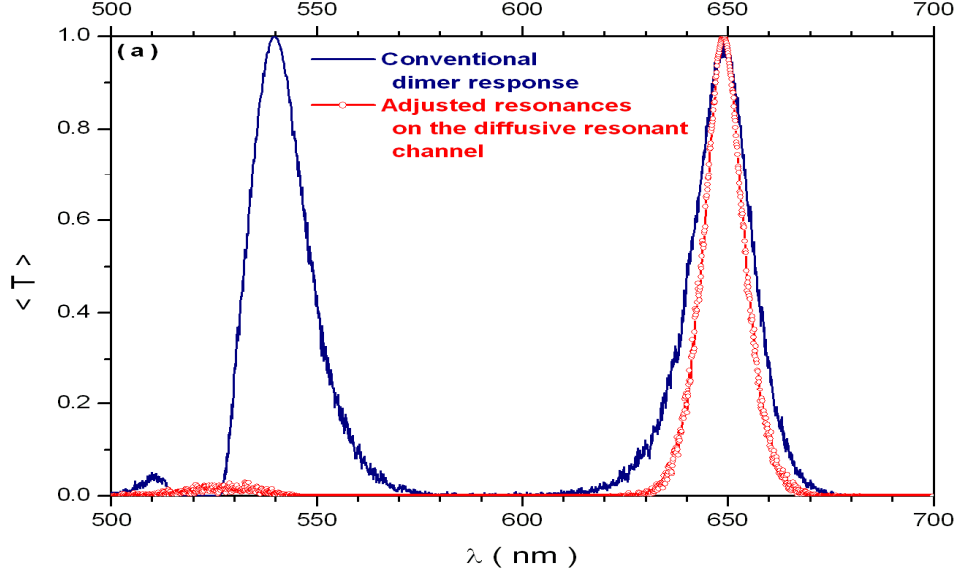


FIG. III 9 (b) Coefficient de transmission après alignement des résonances $\lambda_{h1} \equiv \lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$

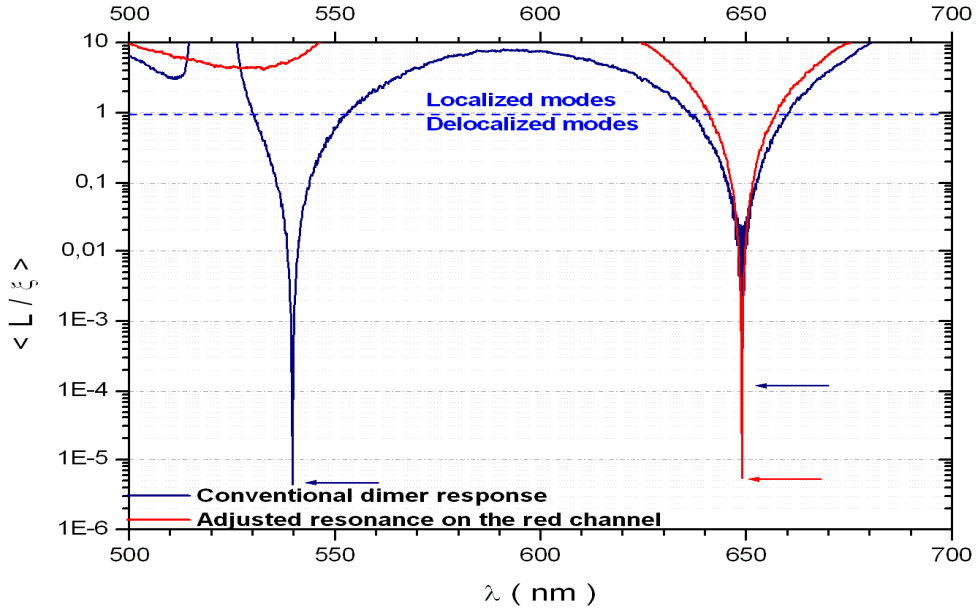


FIG.III 9(c) Coefficient de Lyapunov réduit après alignement des résonances $\lambda_{h1} \equiv \lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$

Dans le but d'identifier la nature de ce mode résonant et de vérifier cette hypothèse, $\langle T(N, \lambda_{d2}) \rangle$ est examiné sur la Fig.III 9(c). L'allure de la fonction enveloppe correspondante montre que cette résonance diffère quasiment de la résonance dimère conventionnelle. Présentant $\langle T(N, \lambda_{d2}) \rangle = 1$ indépendamment de la longueur du système, la transmission est nettement améliorée : le régime balistique s'installe à la résonance dimère et remplace ainsi le régime diffusif conventionnel.

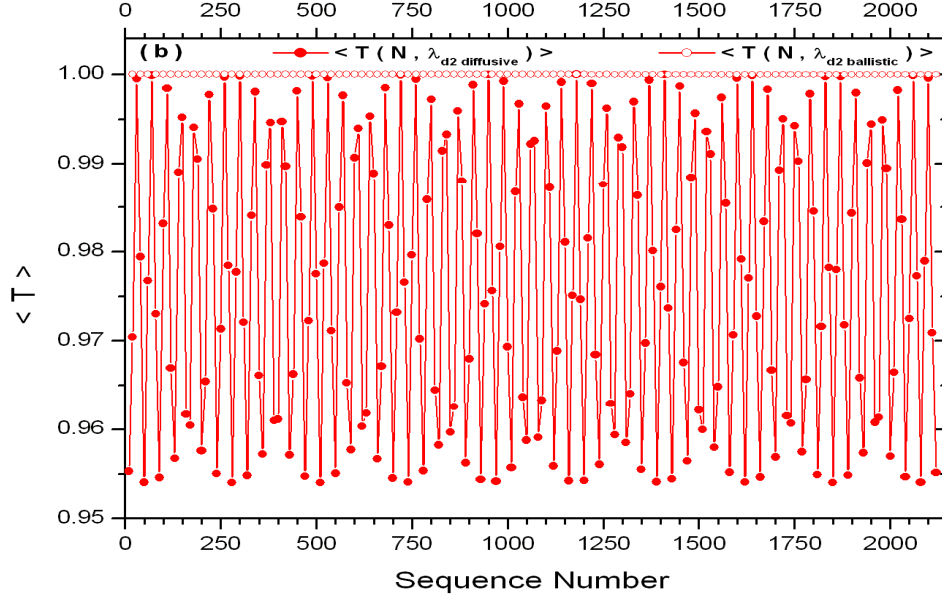


FIG. III 9 (d) Apparition du régime balistique après alignement des résonances $\lambda_{h1} \equiv \lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$

En effet, comme les termes de phase correspondants aux cellule défaut dimère (ACAC) et mono couche hôte (B) sont identiques à la longueur d'onde commune $\lambda_{h1} \equiv \lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$, aucune distinction entre ces deux élément identiquement transparents $\delta_{ACAC} = \delta_B = \pi$ est réalisée donnant lieu à des conditions de propagation dans le réseau hôte encore plus favorables.

Aussi présentant un coefficient de Lyapunov plus prononcé et une longueur de localisation plus importante ($\xi_{ballistic}(\lambda_{d2}) = 20\xi_{diffusive}(\lambda_{d2})$), le mode de transmission résonant obtenu par l'alignement de des deux résonances $\lambda_{h1} \equiv \lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$ est plus étendu. La finesse du pic de transmission, nous amène aussi à constater que ce système est plus sensible aux effets du désordre.

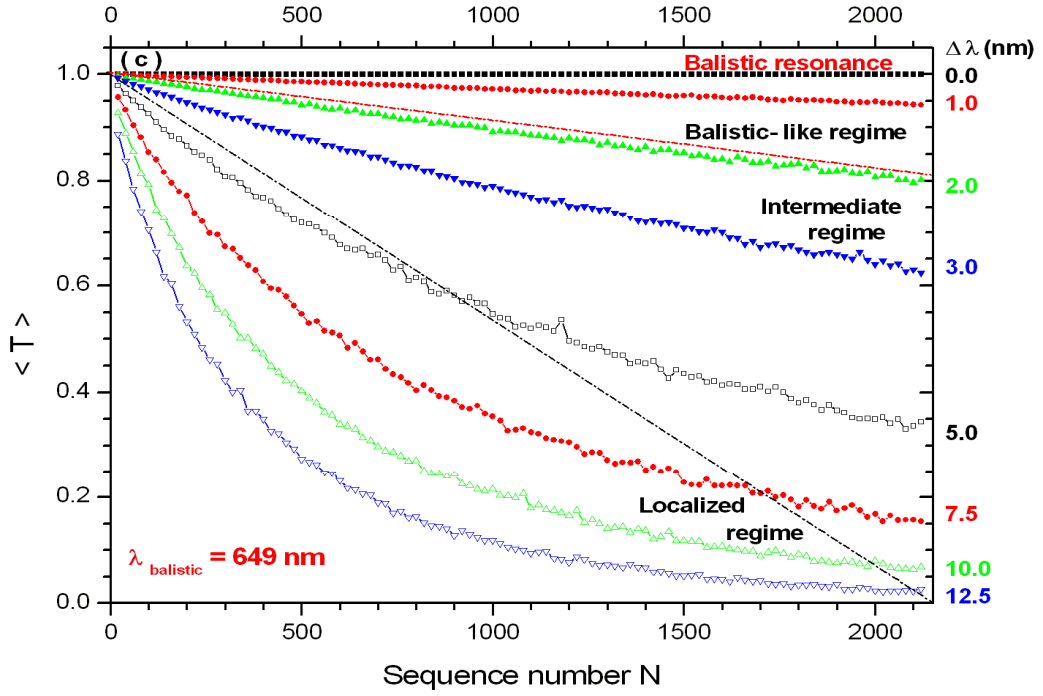


FIG. III 9 (e) Régimes de transmission appartenant à la mini-bande après alignement des résonances $\lambda_{h1} \equiv \lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$

La description des modes de transmission relatifs à ce pic de résonance montre que les états étendus restent quasi balistiques jusqu'à $\Delta\lambda \approx 2 \text{ nm}$. Le régime intermédiaire est identifiable jusqu'à $\Delta\lambda \approx 4 \text{ nm}$. Au-delà de cette valeur, la localisation d'Anderson devient de plus en plus dominante avec des modes propres de plus en plus confinés à l'intérieur de la structure.

b. Alignement sur la résonance stationnaire principale hôte.

Conformément à la démarche précédente, nous procédons à l'alignement des modes résonants par le déplacement de la résonance dimère défaut située à $\lambda_{d2} = 649 \text{ nm}$ vers le canal de la résonance stationnaire principale hôte située à ($\lambda_{h1} = 540 \text{ nm}$), tel que

$$\lambda_{d2} \equiv \lambda_{h1} = 540 \text{ nm} \quad (\text{III.19})$$

Dans ce cas, l'effet dimère aléatoire est examiné pour décrire l'influence de la résonance dimère sur les propriétés de transmission de résonance stationnaire du motif hôte. Nous nous intéressons en particulier aux modes de propagation autour de la résonance et aux différentes transitions de phase susceptibles d'apparaître sur le spectre de transmission.

En tenant compte de la condition d'alignement $\lambda_{d2} = \lambda_{h1}$, la relation de dispersion du motif défaut donnée par l'équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney s'écrit :

$$\kappa_{AC}(\lambda_{d2}) = \cos [\delta_A(\lambda_{d2})] \cos(\pi) - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_A k_C}{\varepsilon_C k_A} + \frac{\varepsilon_C k_A}{\varepsilon_A k_C} \right) \sin [\delta_A(\lambda_{d2})] \sin(\pi) \quad (\text{III.20})$$

Le motif dimère défaut devient transparent ($\kappa_{AC}(\lambda_{d2} \equiv \lambda_{h1}) = 0$) si et seulement si :

$$\delta_A(\lambda_{d2} \equiv \lambda_{h1}) = \frac{\pi}{2} \quad (\text{III.21})$$

Cette contrainte supplémentaire est synonyme à l'introduction de la lame quart d'onde comme couche séparatrice (A) dans chaque motif défaut (AC). Conformément à Eq.III.21, l'épaisseur caractéristique de cette couche est donnée par :

$$b_A(\lambda_{h1}) = \frac{\lambda_{h1}}{4\sqrt{\varepsilon_A}} = 135 \text{ nm} \quad (\text{III. 22})$$

En conséquence, une nouvelle distribution binaire topologique :

$$P(b_j) = \begin{cases} c_B \delta(b_j - b_{0B}) + c_C \delta(b_j - b_{0C}) & \text{pour } j \text{ paire} \\ c_B \delta(b_j - b_B) + c_C \delta(b_j - b_C) & \text{pour } j \text{ impaire} \end{cases} \quad (\text{III.23})$$

est considérée. Les paramètres $b_{0C} = b_A(\lambda_{h1}) = 135 \text{ nm}$ et $b_{0B} = 250 \text{ nm}$ représentent les épaisseurs de couches séparatrices appartenant aux cellules défaut (AC) et hôte (AB) respectivement. A partir des relations de dispersion de ces motifs et de leurs profils de transmission individuels ($T_{AB}(N=1)$ et $T_{AC}(N=1,2)$), nous pouvons aisément vérifier (comme prévu) que la condition d'alignement (Eq. III. 19) est vérifiée à la longueur d'onde stationnaire hôte. Ceci est traduit par $T_{AB}(\lambda = 540 \text{ nm})|_{N=1} = 1$ et $\kappa_{AC}(\lambda = 540 \text{ nm}) = 0$ respectivement sur Fig. III.10.

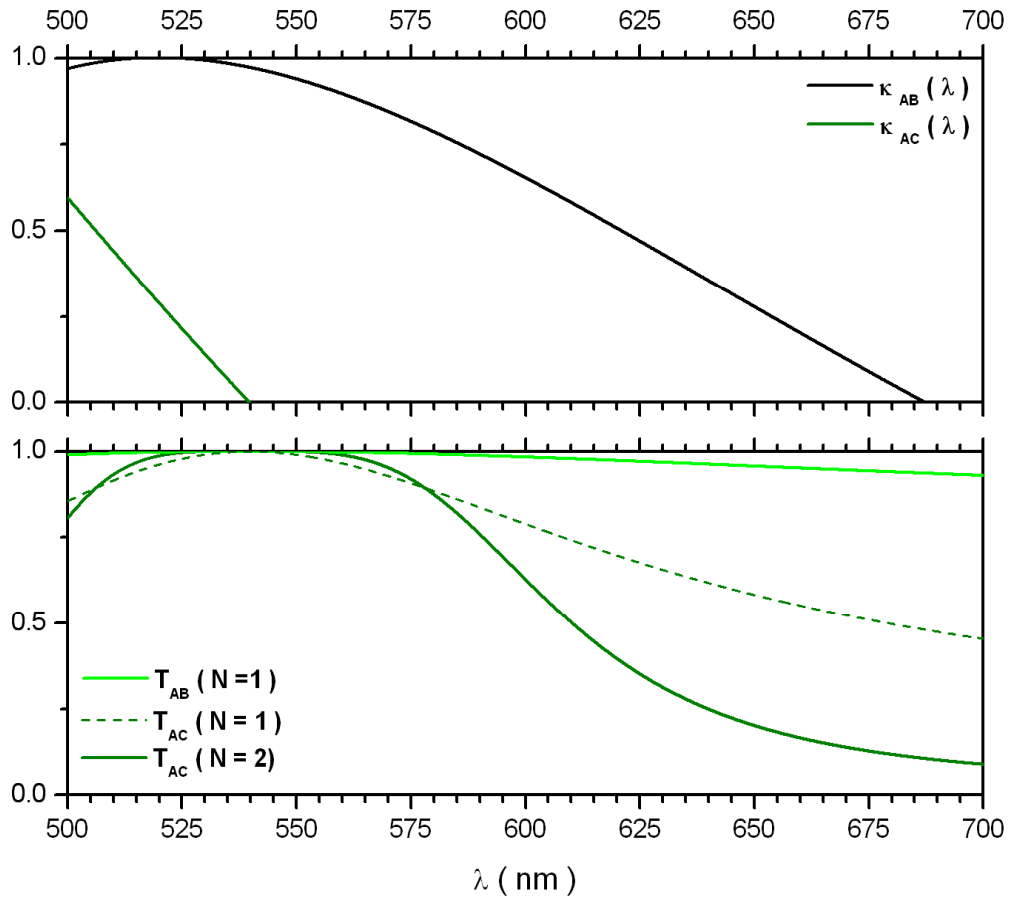


Fig. III.10(a) Ajustement des paramètres structuraux pour vérification de la condition d'alignement des fréquences $\lambda_{d2} \equiv \lambda_{h1} = 540 \text{ nm}$

Par ailleurs, dans le cas du modèle du dimère aléatoire (Fig.III 11(b)), les réponses de la transmission et de la longueur de la localisation reproduisent la condition de résonance du modèle généralisé de Kronig- Penney : le pic de la résonance dimère apparaît sur le spectre de transmission à $\lambda = 540 \text{ nm}$. Néanmoins contrairement aux cas précédents, cette résonance est plus large à son sommet, ouvrant ainsi un domaine de fréquences plus appréciable pour les modes étendus ($\langle T \rangle = 1$) autour de la résonance. A mi hauteur, le pic s'est également élargi, fournissant au système des modes de transmission plus délocalisés que ceux du mode quasi balistique résultant de l'alignement des modes stationnaires hôte et défaut (précédemment examiné). Le comportement du coefficient de Lyapunov confirme également cette tendance. A titre d'exemple, la longueur de localisation se retrouve améliorée d'un rapport de 10^3 à la résonance par rapport au cas du modèle du dimère généralisé (Fig. III 10(b))

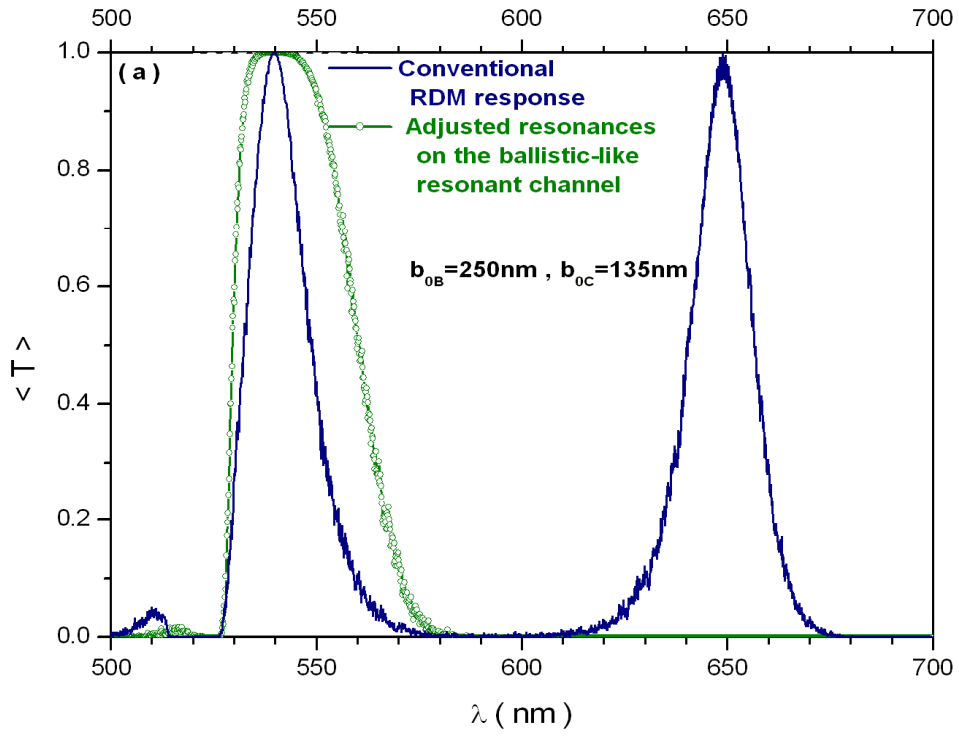


Fig. III 10 (b) Profil de transmission après l'alignement des résonances $\lambda_{d2} \equiv \lambda_{h1} = 540 \text{ nm}$

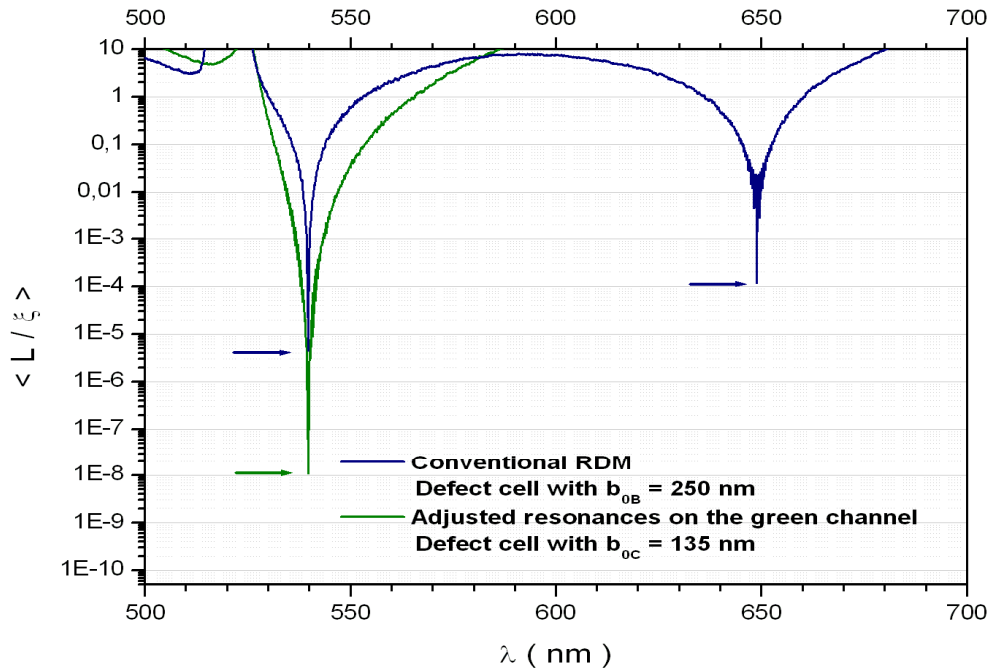


Fig. III 10 (c) Le coefficient de Lyapunov réduit après l'alignement des résonances sur

$$\lambda_{d2} \equiv \lambda_{h1} = 540 \text{ nm}$$

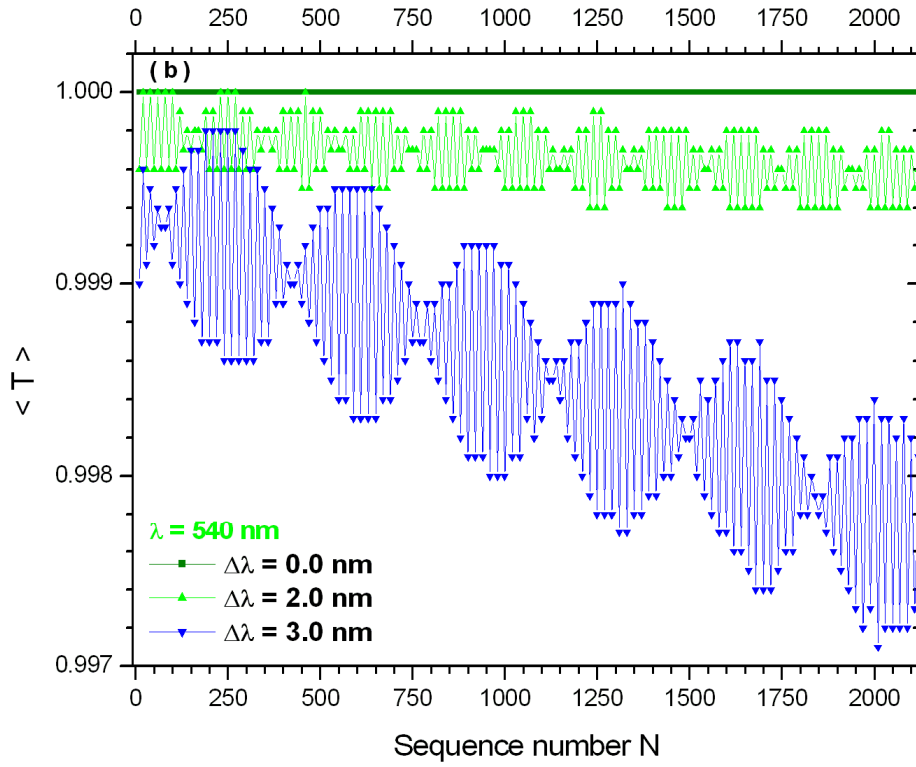


Fig. III. 10 (d) Apparition d'un régime mixte (balistique et diffusif) au voisinage proche de la résonance balistique ($\lambda = 540 \text{ nm}$)

A travers le comportement de la fonction enveloppe, la transmission à la résonance est balistique ($\langle T(N) \rangle = 1$) (voir Fig. III.10(d)). Par contre, à son voisinage immédiat ($\Delta\lambda < 3\text{nm}$), le régime de transmission perd le caractère linéaire de la transmission quasi balistique et se présente sous une forme pseudopériodique à amplitude linéairement décroissante, synonyme d'une transmission quasi-balistique à caractère mixte.

Cette configuration particulière du désordre binaire corrélé pour laquelle la résonance dimère défaut est superposée à la résonance stationnaire hôte, est complètement différente de celle du régime quasi balistique, tel qu'introduite dans le modèle généralisé à la résonance stationnaire hôte. Au-delà de $\Delta\lambda = 3.0\text{nm}$, les modes de transmission mixte quasi diffusifs restent indentifiables jusqu' à $\Delta\lambda = 7.5\text{nm}$. A partir de $\Delta\lambda = 11.0\text{nm}$, toutes les signatures pseudopériodiques disparaissent au fur et à mesure que la localisation d'Anderson devient de plus en plus dominante ($\xi \ll L$).

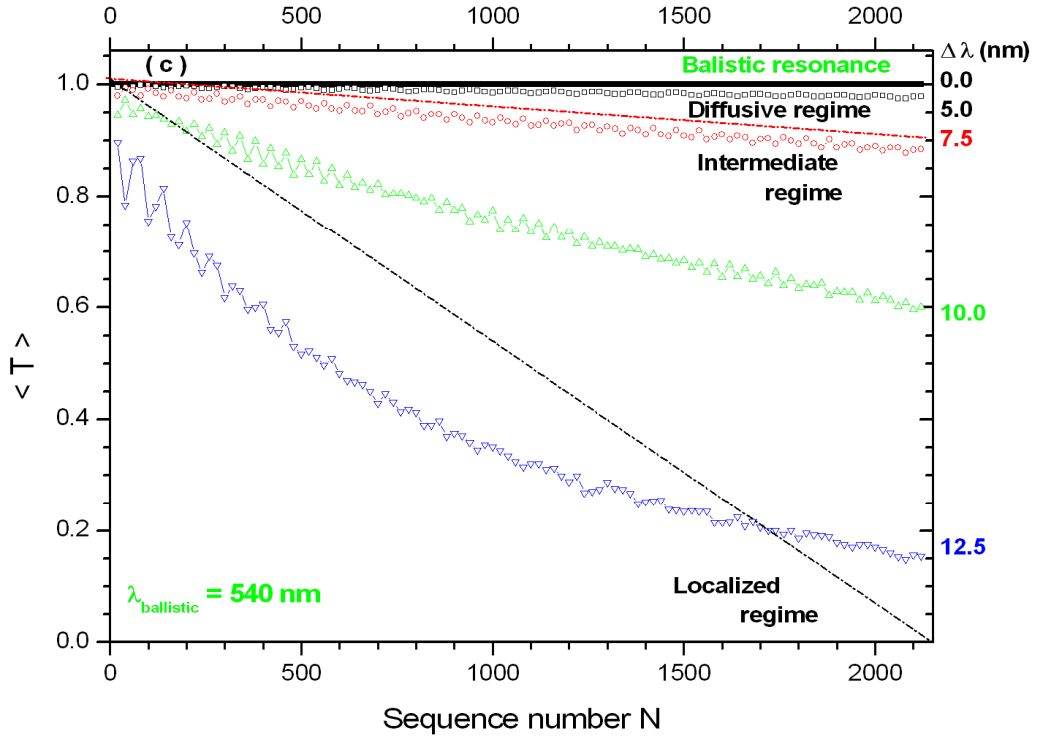


Fig. III 10 (c) Régimes de transmission dans la mini bande résonante autour de la résonance dimère balistique ($\lambda = 540nm$)

Finalement compte tenu des améliorations que les couches quart-d'onde séparatrices défauts, ont introduites dans le spectre de transmission, une autre configuration d'alignement des modes résonants est proposée. Celle-ci correspond à la présence de couches séparatrices (quart d'onde) identiques :

$$b_{0B} = b_{0C} = 135nm \quad (III.24)$$

sur toute la structure aussi bien dans le motif hôte (AB) que dans le motif défaut (AC).

En reprenant la démarche habituelle, les relations de dispersion et les profils de transmission des cellules élémentaires hôte et défaut sont décrits séparément sur Fig. III 12(a) Pour une telle configuration, la contrainte d'alignement entre la résonance de transparence du défaut dimère ($\kappa_{AC}(\lambda) = 0$) et la résonance stationnaire du motif hôte $T_{AB}(\lambda) \big|_{N=1} = 1$ est clairement vérifiée à $\lambda = 540nm$

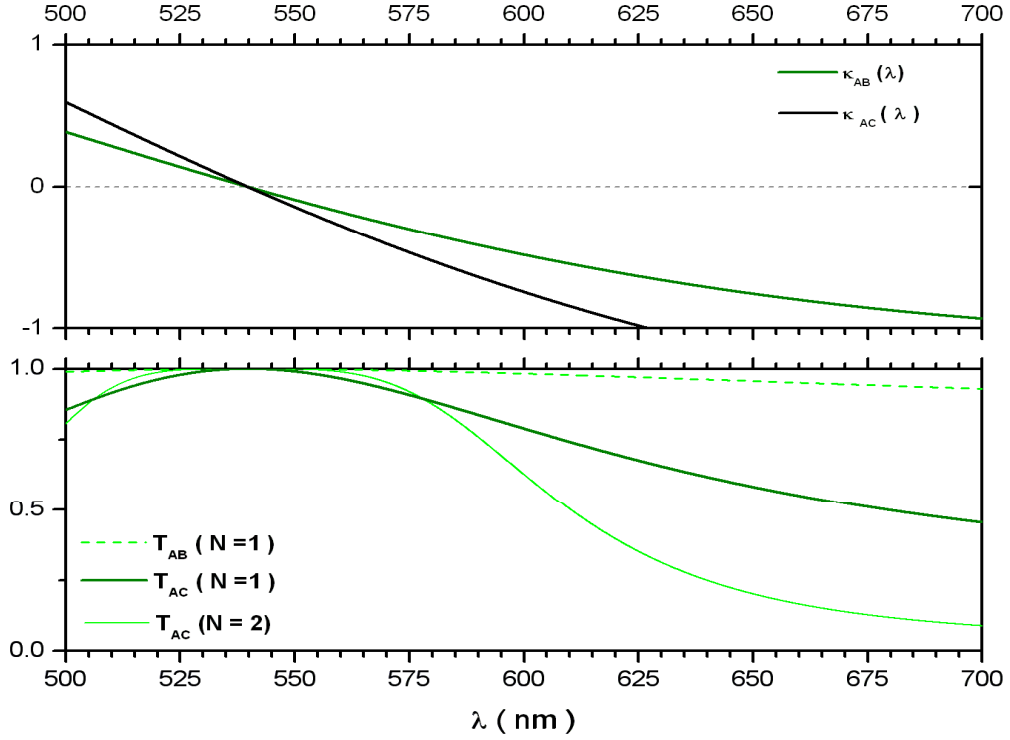


Fig. III 12(a) Vérification de l'alignement des résonances caractéristiques sur $\lambda = 540nm$
après ajustement des paramètres structuraux des motifs $b_{0B} = b_{0C} = 135nm$

Cette configuration qui est encore plus intéressante que celle du cas précédent, du fait qu'elle reproduit aussi à la même fréquence une situation supplémentaire d'indiscernabilité des motifs dimère hôte et défaut ($\kappa_{AB}(540) = \kappa_{AC}(540)$). Cette situation particulière nous permet d'introduire la notion de la commutation de transparence optimisée des motifs dimère, à travers :

$$\begin{cases} \kappa_{AC}(\lambda) = 0 \\ et \\ \kappa_{AB}(\lambda) = \kappa_{AC}(\lambda) \end{cases} \quad (III.25)$$

permettant ainsi de résoudre l'équation généralisée de la résonance dans les systèmes binaires désordonnés (Eq.III.16). Une comparaison avec la configuration dimère précédente montre que la mini-bande des modes étendus à la résonance s'est élargie encore plus aussi bien au sommet qu'à la base. L'amélioration du coefficient de transmission est due à la contribution des modes de transmission plus étendus provenant de la transparence du motif hôte après l'ajustement convenablement établi de ses paramètres intrinsèques (de $b_{0B} = 250nm$ à $b_{0C} = 135nm$).

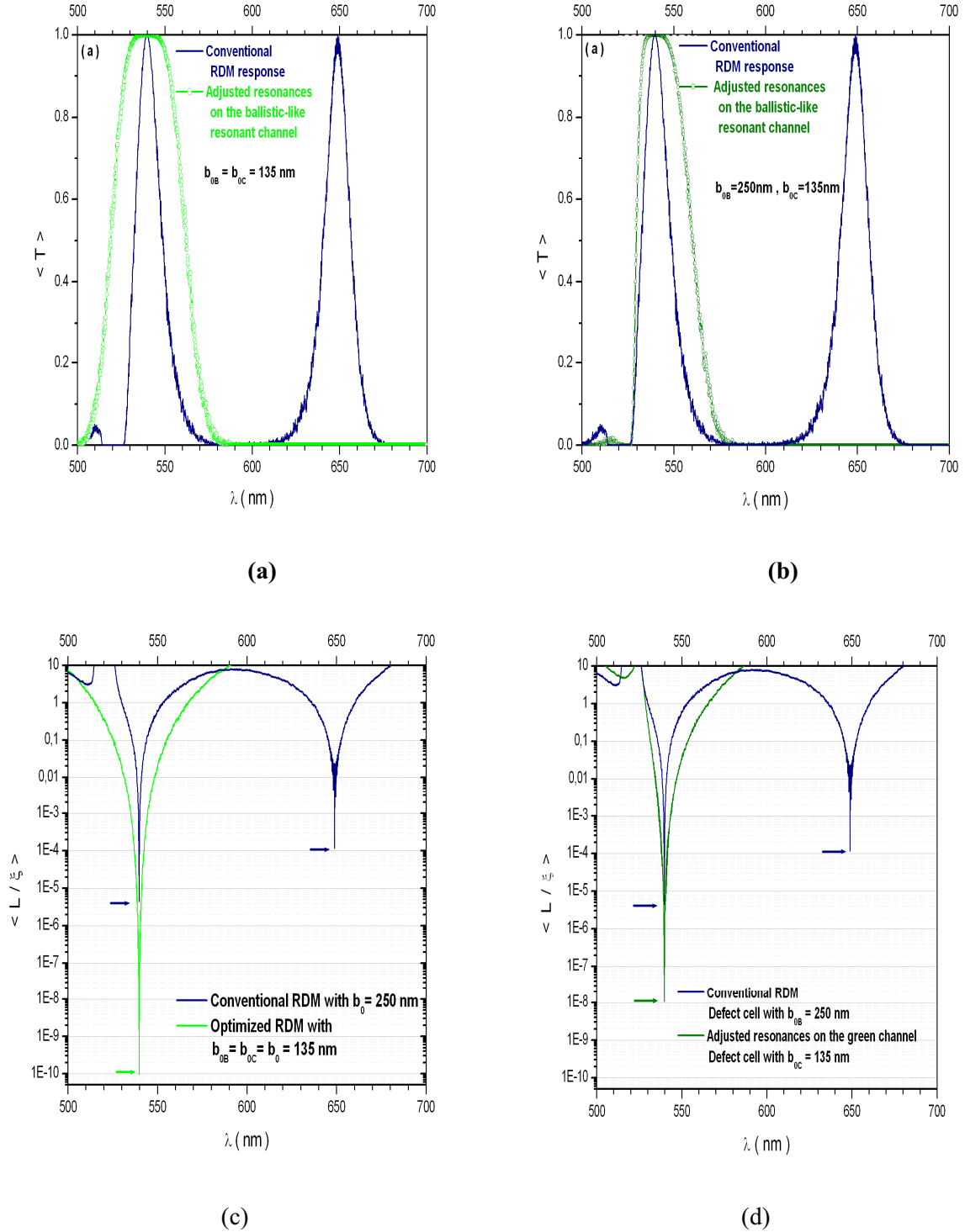


Fig. III 13 Comparaison entre les réponses de la transmission (a et b) et des longueurs de localisation (c et d) relatives aux deux situations d'ajustement des paramètres

$b_{0B} = b_{0C}$ (à gauche) et $b_{0B} \neq b_{0C}$ (à droite)

Sur le profil du coefficient de Lyapunov réduit, les modes de transmission deviennent plus étendus. A la résonance, ce coefficient atteint une valeur insignifiante de l'ordre de 10^{-10} , donnant lieu à une singularité beaucoup plus importante et une fonction enveloppe encore plus étalée dans l'espace.

Dans ces conditions de propagation plus favorables, la nature des modes correspondants au voisinage de ce canal résonant est examiné sur Fig. III. 13 (e) et (f) : A la résonance, la transmission reste par excellence balistique ($\langle T(N) \rangle = 1$). A son voisinage le plus proche et contrairement à la configuration d'alignement précédente de la résonance balistique mixte (voir Fig.III.10(d)), la fonction enveloppe conserve son comportement linéaire. Dans ce domaine, la décroissance du coefficient de transmission est tellement insignifiante que le régime de transmission balistique est quasiment préservé jusqu'à $\Delta\lambda = 5nm$. Au-delà de cette valeur, le régime quasi balistique reste identifiable jusqu'à $\Delta\lambda = 13nm$ donnant à cette résonance un caractère purement balistique. Le régime intermédiaire s'étend dès alors jusqu'à $\Delta\lambda = 17nm$. A partir de cette valeur, la localisation d'Anderson devient dominante en fournissant au système des modes de transmission de plus en plus localisés ($\xi \ll L$)

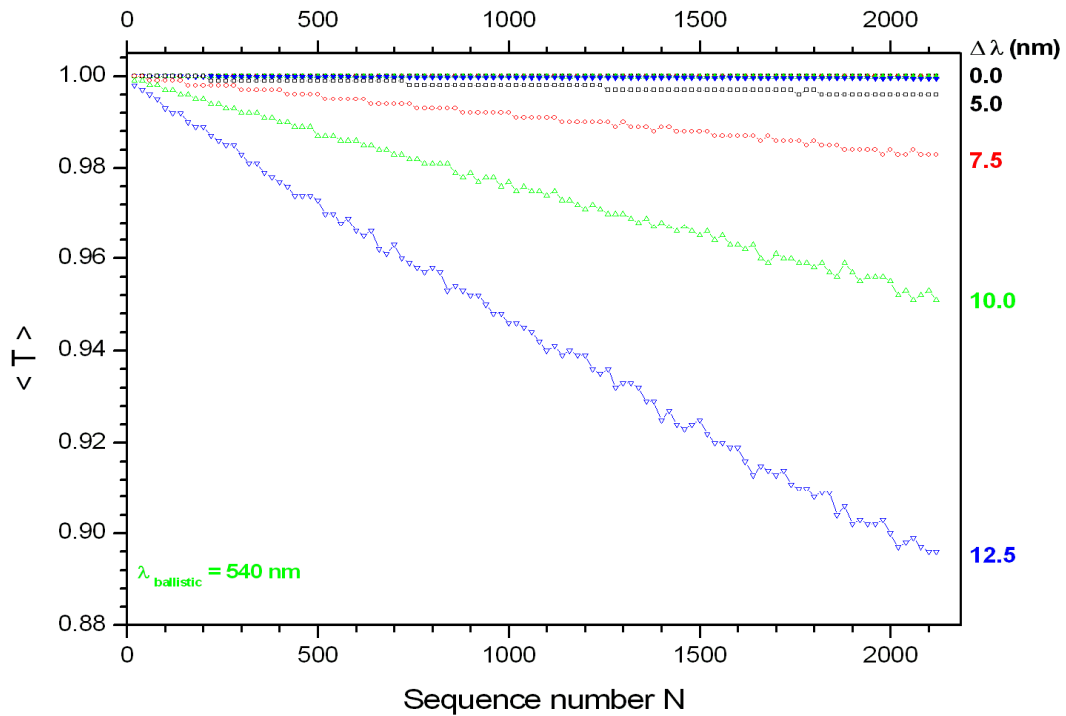


Fig. III 13 (e) Réponse de la transmission balistique pure au voisinage de la résonance dimère balistique

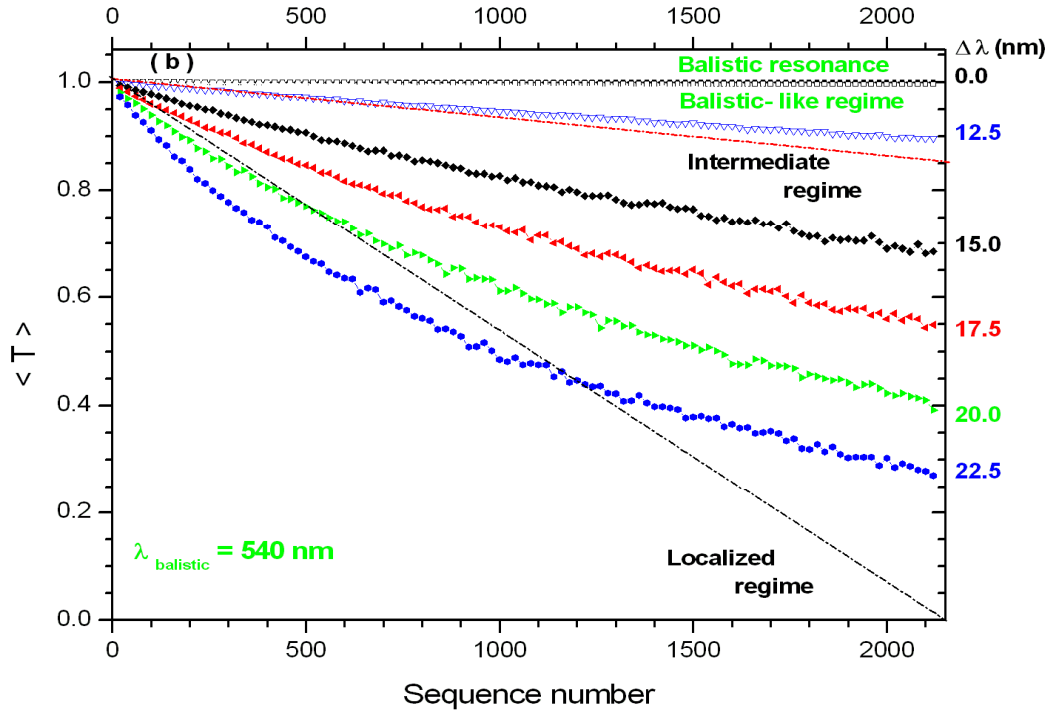


Fig. III 13 (f) Régimes de transmission appartenant à la mini-bande permise de la résonance balistique dimère pure.

Cette configuration est la plus intéressante. La notion de la commutation des résonances dimère hôte et défaut fournit un domaine de fréquences non négligeable pour lequel le régime de transmission est balistique. Ceci ouvre une possibilité intéressante sur la conception de filtres optiques balistique à largeur de mini-bande passante appréciable et totalement ajustable autour de la résonance dimère balistique.

II. 5. Conclusion

La propagation des ondes électromagnétiques en incidence normale dans une structure multicouche désordonnée (à fort contraste de désordre compositionnel) à été étudiée dans le cadre du modèle du dimère aléatoire. La présence d'une corrélation de désordre à courte portée détruit la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels et fournit à cette structure particulièrement désordonnée un ensemble de modes de transmission étendus à caractère diffusif. C'est l'effet dimère conventionnel

Par ailleurs, l'application de la condition de Bragg sur une longueur d'onde permise commune a favorisé l'émergence d'une résonance additive dans le modèle du dimère aléatoire généralisé. Présentant un profil de transmission quasi-balistique, cette résonance d'indiscernabilité des motifs défauts et hôte est équivalente à la résonance de commutation balistique apparue dans le système de la corde vibrante chargée en masses-ressorts

L'application de la procédure d'alignement de ces résonances sur des fréquences communes a permis l'amélioration des propriétés de transmission du modèle du dimère aléatoire généralisé : l'ajustement convenable des paramètres structuraux des motifs hôte et défaut a permis l'installation du régime de transmission balistique à la résonance dimère. Des filtres optiques balistiques et à réponses totalement ajustables peuvent être conçus. Une large bande de modes étendus est obtenue au voisinage de la résonance de commutation de transparence optimisée (voir cas (d) dans tableaux III.1 et 2.).

Tableaux récapitulatifs

Configuration Modèle Dimère Aléatoire	type du motif	$b_{(B \text{ ou } C)} \text{ (nm)}$	$b_A \text{ (nm)}$	$\lambda_1 \text{ (nm)}$	$\lambda_2 \text{ (nm)}$
a- Conventionnel généralisé	hôte (B)	180	250	540	688
	défaut (C)	75	250	540	649
b- Alignement sur la résonance du défaut dimère	hôte (B)	216	250	649	-
	défaut (C)	75	250	540	649
c- Alignement sur la résonance stationnaire principale hôte avec transition de phase balistique mixte	hôte (B)	180	250	540	688
	défaut (C)	75	135	540	540
d- Alignement sur la résonance stationnaire principale hôte avec transition de phase balistique pure	hôte (B)	180	135	540	540
	défaut (C)	75	135	540	540

Tableau III.1 : Paramètres utilisés pour les motifs défaut et hôte pour chaque configuration dimère examinée. (La résonance stationnaire principale en λ_1 est équivalente à la résonance libre des systèmes mécaniques masse-ressort). Le cas (d) représente la résonance de commutation de transparence optimisée.

	Cas (a) Résonance inférieure	Cas (a) Résonance supérieure	Cas (b)	Cas (c)	Cas (d)
Longueur d'onde de résonance $\lambda \text{ (nm)}$	540	649	649	540	540
Coefficient de Lyapunov réduit $< \frac{L}{\xi} >$	$4.5 \cdot 10^{-6}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$	$5.5 \cdot 10^{-6}$	$1.1 \cdot 10^{-8}$	$9.7 \cdot 10^{-10}$
Transmission à la résonance	Quasi- balistique	Diffusif	Balistique	Balistique	Balistique
Régime de modes quasi-étendus $\Delta\lambda \text{ (nm)}$	Quasi- balistique $0 < \Delta\lambda < 3$	Quasi- diffusif $0 < \Delta\lambda < 2$	Quasi- balistique $0 < \Delta\lambda < 2$	Quasi- diffusif $0 < \Delta\lambda < 7$	Quasi- balistique $0 < \Delta\lambda < 13$
Régime intermédiaire $\Delta\lambda \text{ (nm)}$	$3 < \Delta\lambda < 5$	$2 < \Delta\lambda < 6$	$2 < \Delta\lambda < 4$	$7 < \Delta\lambda < 11$	$13 < \Delta\lambda < 17$
Régime localisé $\Delta\lambda \text{ (nm)}$	$\Delta\lambda > 5$	$\Delta\lambda > 6$	$\Delta\lambda > 4$	$\Delta\lambda > 11$	$\Delta\lambda > 17$

Tableau III. 2 : Propriétés de transmission à la résonance et régimes de transmission pour chaque configuration dimère examinée.

Bibliographie

1. J.D. Joannopoulos, R.D. Maede and J.N. Winn, *Photonic crystals , molding the flow of light*. Princeton university, Princeton, New Jersey, (1995)
2. S. J. Johnson and J.D. Joannopoulos, *Photonic crystals, the road from theory to practice* , Kluwer Academic Publisher, Norwell, Massachussets, (2002).
3. K. Sakoda, *Optical properties of photonic crystals*, Springer Verlag, Berlin, (2001)
4. P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media* Wiley, Hoboken N.J., USA (2005),
5. E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987); S. John, Phys. Rev. Lett.**53**, 2169 (1987).
6. E.Osbay et al. Photonics and nanostructures **2**, 87(2007)
7. S.M. Sze, *Semiconductor devices: Physics and technology*, John Wiley and Sons, (2001)
8. W. H. Bragg and W. L. Bragg, *The reflection of X-rays by crystals*, Proc. Roy. Soc. (London) A **88**, 428 (1913).
9. R. de L. Kronig and W.G. Penney, *Quantum mechanics of electrons in crystal lattices*, Proc. Roy. Soc. (London) A **130**, 499 (1931).
10. S.M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, John Wiley & Sons (1981).
11. H. Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et composants électroniques*, édition Masson, Paris, France (1996).
12. L.Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop.**14**, 61(1970).
13. M.O. Vassel, J. Lee and H.F. Lockwood, J. Appl. Phys. **54**, 5206 (1983); K.F. Brennan and C.J. Summers , J. Appl. Phys. **61**, 614 (1987)
14. S. Bentata, *Etudes des phénomènes de transport dans les systèmes à une dimension*. Thèse de Doctorat. Université des Sciences et de la Technologie d'Oran, Algérie (2002).
15. H. Dunlap, H. L. Wu and P. Phillips, Phys. Rev.Lett.**65**, 88 (1990), P. Phillips, H.L. Wu, Sciences **252**, 1805(1992), H. L. Wu, W. Goff and P. Phillips, Phys. Rev. B **45**, 1623 (1992).
16. A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, J. Phys. A: Math. and Gen. **27**, 3725 (1994); E. Diez, A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B **50**, 14359 (1994); F.Domínguez-Adame, A. Sánchez, and E. Diez, Phys. Rev. B **50**, 17736 (1994). A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, G. Berman, and F. Izrailev ; Phys. Rev. B **51**, R6769 (1995); E. Diez, A. Sanchez and F. Domínguez-Adame; IEEE J. of Quantum Elect. **31**, 1919 (1995); E. Diez, A. Sánchez and F. Domínguez-Adame, Solid State Elect. **40**,

- 433 (1996); F. Domínguez-Adame, E. Diez and A. Sánchez; J. Appl. Phys. **81**, 777 (1997).
17. T. Hakobyan, D. Sedrakyan, A. Sedrakyan, I. Gómez and F. Domínguez-Adame. Phys. Rev. B **61**, 11432 (2000).
18. A. Parsini, L. Tarricone, V. Bellani, G. B. Parravicini, E. Diez, F. Domínguez-Adame, R. Hey. Phys. Rev. B **63**, 165321 (2001).
19. I. Gómez, F. Domínguez-Adame and E. Diez; Physica B **324**, 235 (2002).
20. S. Bentata, B. Ait Saadi and H. Sediki, Superlatt. and Microstruct. **30**, 297 (2001)
21. M. Hilke, J. C. Flores and F. Domínguez-Adame; Phys. Rev. B **58**, 8837 (1998)
22. V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, and R. Gómez-Alcalá; Phys. Rev. Lett. **82**, 2159 (1999).
23. S. John, Phys. Rev. Lett. **53**, 2169 (1987).
24. E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. **58**, 2059 (1987).
25. J.D. Joannopoulos, P.R. Villeneuve and S. Fan, Nature (London) 386, **143** (1997), C.M. Soukoulis, *Photonic Bandgap Materials*, Dordrecht: Kluwer, (1996).
26. D.S. Wiersma, R. Sapienza, S. Mujumdar, M. Collocci, M. Ghulyanan and L. Pavesi, J. Opt. A : Pure Appl. Optics **7**, S190 (2005).
27. M.P. Van Albada and A. Lagendijk , Phys. Rev. Lett. **55**, 2692 (1985).
28. Y. Lu, R.W. Peng, Z. Wang, Z.H. Tang, X.Q. Huang, Mu Wang, Y. Qiu, A. Hu, S.S. Jiang and D. Feng , J. Appl. Phys. **97**, 123106 (2005); R.W. Peng, Y.M. Liu, X.Q. Huang, F. Qiu, Mu Wang, A. Hu, S.S. Jiang, D. Feng, L.Z. Ouyang and J. Zou , Phys. Rev. B. **69**, 165109 (2004).
29. M.P. Van Albada, J.F. de Boer and A. Lajendijk, Phys. Rev. Lett. **64**, 2787 (1990), P. Sebbah, B. Hu, A.Z. Genack, R. Pnini and B. Shapiro, Phys. Rev. Lett. **88**, 123901 (2002).
30. M. Kohmoto, H. Sutherland and K. Iguchi, Phys. Rev. Lett. **58**, 2436 (1987).
31. T. Hattori, N. Tsurumachi, S. Kawato and H. Nakatsuka, Phys. Rev. B **50**, 4220 (1994).
32. Z. Zhao, F. Gao , R.W. Peng, L.S. Cao , D. Li, Z. Wang , M. Wang , C. Ferrari , Phys. Rev. B. **75**, 165117 (2007)
33. Xin-Ya Lei, Hua Li. Fang Ding, Weiyi Zhang, Nai-Bai Ming, Appl. Phys. Lett. **71**, 2889 (1997); N. Zekri, H. Bahlouli and F. Brouers, Phys. Lett. A **234**, 391 (1997).
34. P.W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958); Philos. Mag. B. **52**, 505 (1985); E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)

35. E.M. Nascimento, F.A.B.F. de Moura and M. Lyra, Phys. Rev. B **76**, 115120 (2007).
36. P. Yeh, *Optical Waves in Layered Media*, Wiley, Hoboken N.J., USA (2005).
37. V. Lousse, *Etude Théorique de l'introduction de réflecteurs à cristaux photoniques dans les dispositifs optroniques planaires*. Mémoire de DEA, Université de Namur (FUNDP), Belgique (2002); V. Lousse. *Etude théorique des phénomènes de bistabilité dans les structures optiques non linéaires intégrant des cristaux photoniques*. Thèse de Doctorat, Université de Namur(FUNDP), Belgique(2003); C. Vandembem. *Contribution à l'étude de la réflectance et du confinement des modes dans les systèmes optiques stratifiés*. Thèse de Doctorat, Université de Namur (FUNDP), Belgique (2006).
38. J. Bellissard, A. Formoso, R.Lima and D. Testard, Phys. Rev. B **26**, 3024 (1981)
39. C. Vandembem, *Etude Théorique des Modes électromagnétiques de surface à partir d'une description effective des multicouches diélectriques*. Mémoire de DEA. Université de Namur (FUNDP), Belgique (2005).
40. C.M. Soukoulis, *Photonic band gap localization*, Plenum New-York (1993).
41. F. Dominguez-Adame, E. Diez, Physica. B **324**, 235(2002), S. Bentata, Superlatt. Microstruct.**37**, 292 (2005).
42. M.J.M de Jong, Phys. Rev. B.**49**, 7778 (1994).

Chapitre 4

Propagation des ondes électroniques dans les nanotubes de carbone dopés

Chapitre 4

Propagation des ondes électroniques dans les nanotubes de carbone dopés

I.	Introduction sur les nanotubes de carbone parfaits	165
	1. Propriétés structurales des nanotubes de carbone monofeuillets	167
	2. Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monofeuillets	170
	2.1. Du graphène aux nanotubes de carbone	170
	a- Description de la structure de bandes du graphène par la méthode des liaisons fortes	170
	b- La méthode de repliement de zone	173
	c-Aperçu sur la DFT et la base d'orbitales atomiques numériques ...	175
	2. 2. Propriétés de transport des nanotubes de carbone parfaits	177
	a-Approche de Buttiker-Landauer	177
	b- Formalisme mathématique pour la transmission électronique dans les nanotubes de carbone : Méthode de la fonction de Green	179
	2.3 Description des propriétés de transport dans les nanotubes parfaits : Cas des nanotubes (10,10) métallique et (17,0) semi-conducteur	182
II.	Etude des propriétés de transport des nanotubes de carbone à dopages de substitution	185
	1. Problème de diffusion à une impureté dans les nanotubes de carbone : Cas du dopage en substitution à l'Azote (N) (au Bore (B))	187
	2. Propriétés de transport des nanotubes de carbone co-dopés à l'Azote (N) et au Bore (B).....	191
	a- Le problème de diffusion à une paire BN dans le nanotube de carbone...	192
	b- Le problème de diffusion à un monodomaine BN dans le nanotube de carbone	194
	c- Le phénomène de résonance par effet dimère conventionnel	198
III.	Conclusion & perspectives	201
IV.	Bibliographie	202

Dans cette partie, nous nous intéressons aux propriétés de transmission des ondes électroniques dans les nanotubes de carbone dopés : Après un aperçu sur les propriétés structurales et électroniques de l'ordre parfait de ces systèmes quasi-unidimensionnels, la substitution d'un atome hôte de carbone par un défaut Azote (N) (ou Bore (B)) est décrite dans le cadre d'un problème de diffusion à travers une seule impureté N (ou B).

Conformément aux chapitres précédents, nous nous intéresserons à l'examen de l'effet de la corrélation du désordre à courte portée sur les propriétés de transmission de ces structures désordonnées: Partant d'un défaut dimère BN construit particulièrement d'une paire B-N (dont les atomes B et N sont conjointement disposés en premiers voisins), des mono-domaines d'amas défauts BN dont la forme géométrique s'entendant dans la direction transversale, sont considérés.

Dans le cas d'amas nano-domaines BN, une règle de parité B – N semble s'instaurer - pour définir le caractère équivalent donneur (N), accepteur (B) ou même neutre (C) du nanodéfaut - sans pour autant déroger à l'installation progressive d'un effet tunnel avec l'augmentation du nombre de paire BN. Dans ce contexte particulier de conductances de plus en plus amoindries par l'extension spatiale de plus en plus considérable du nano-domaine BN dans le nanotube, le monodomaine BN est reconsidéré conformément à la conception conventionnelle du motif dimère. Synonyme d'interférences constructives, l'effet tunnel résonant est obtenu au sein de ces structures dopées de façons particulières.

En se basant sur une approche *ab-initio* obtenues directement des structures tubulaires, le coefficient de transmission - tel que établi par le formalisme de Büttiker-Landauer- est soigneusement déterminé à l'aide de la méthode de la fonction de Green

I. Introduction sur les nanotubes de carbone parfaits

On pourrait croire que l'origine de la découverte des nanotubes de carbone remonte à l'année 1952, lorsque Rudushkevich et Lukyanovich ont publié dans la revue soviétique *journal of physical chemistry*, des images (encore méconnues) de tubes de carbone d'environ 50 nm de diamètre (Fig.1)[1].

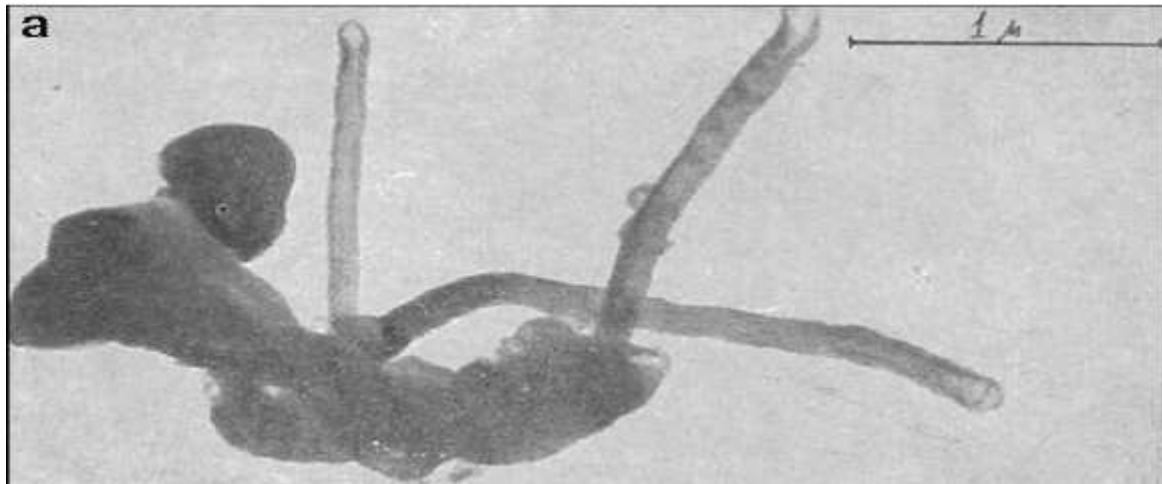


Fig. IV.1. Première image TEM d'un cluster de carbone. Trois nanotubes y sont attachés [1].

Ce type de matériaux a suscité un immense intérêt après l'observation enregistrée par Sumio Iijima en 1991 [3]. Dans son papier original intitulé : *Hélical microtubules of graphitic carbon*, un nouveau type de matériau carboné fini de forme cylindrique a été observé (Fig. IV.2). La microscopie électronique a révélé que chaque structure comprenait des tubes coaxiaux de feuilles de graphite au nombre de 2 à 50. Dans chaque tube, les hexagones d'atomes de carbone sont orientés suivant une direction hélicoïdale par rapport à l'axe de la structure cylindrique. La possible formation de telles structures de longueur de l'ordre du 1 μm et de diamètres pouvant atteindre jusqu'à quelques dizaines de nanomètres a été l'un des précurseurs principaux dans l'ingénierie des structures carbonées actuelles.



Fig. IV. 2. Micrographies électroniques de microtubules de carbone graphitique. Tubes contenant a) 5 feuilles de graphène à diamètre 6.7 nm, b) 2 feuilles de graphène à diamètre 5.5 nm, c) 7 feuilles de graphène à diamètre 6.5 nm. [3].

Présentant des propriétés exceptionnelles liées directement à leur géométrie particulière, ces matériaux ont enregistré un énorme engouement de la part de la communauté scientifique spécialisée. Les nanotubes de carbone conduisent très bien la chaleur [5] et mécaniquement, ces matériaux sont flexibles et aussi rigides que l'acier malgré leur légèreté [6,7]. Quant aux propriétés électroniques (qui font l'objet de notre travail), ces structures présentent une mobilité électronique de l'ordre de $10^5 \text{ cm}^2/\text{V}$, dépassant celle du cuivre et surclassant de loin le silicium avec un rapport de 70. A très basse température (de l'ordre de 15 Kelvin), il a été aussi montré que pour des nanotubes monofeuillets de diamètre de 0.4 nm, ces matériaux deviennent supraconducteurs [8,9]

Par ailleurs, étant formé à partir de carbones hybridés en sp^2 , le nanotube de carbone possède de par sa courbure une réactivité chimique comprise entre celle du graphène et celle du fullerène. La possibilité de fonctionnaliser les tubes en y greffant des molécules particulières sur des sites préférentiels, vient aussi étoffer son registre de matériaux à grand spectre d'application [10,11] : Disposant d'un rapport longueur / largeur pouvant atteindre 1000 (sur la Fig.IV. 2(d), le diamètre d'un nanotube isolé est de l'ordre du nanomètre [4]), ces structures tubulaires sont idéales pour reproduire la physique fondamentale des systèmes mésoscopiques quasi-unidimensionnels. Aussi avec un rapport de courants en fonction du potentiel de grille (ON/OFF) de l'ordre de 10^5 , ces structures sont aussi de bons candidats dans les dispositifs nano électroniques (diodes à effet de champ).

1. Propriétés structurales des nanotubes de carbone monofeuillets

Un nanotube de carbone monofeuillet résulte de l'enroulement cylindrique d'une feuille de graphène dans la direction d'un vecteur \vec{C}_h appelé vecteur chiral. Construit sur la base des vecteurs primitifs de la structure hexagonale du graphène, ce vecteur définit les propriétés structurales de ces systèmes tubulaires: En fonction de l'orientation spatiale de la cellule hexagonale dans le nanotube de carbone, les différentes structures des nanotubes de carbone sont ainsi répertoriées.

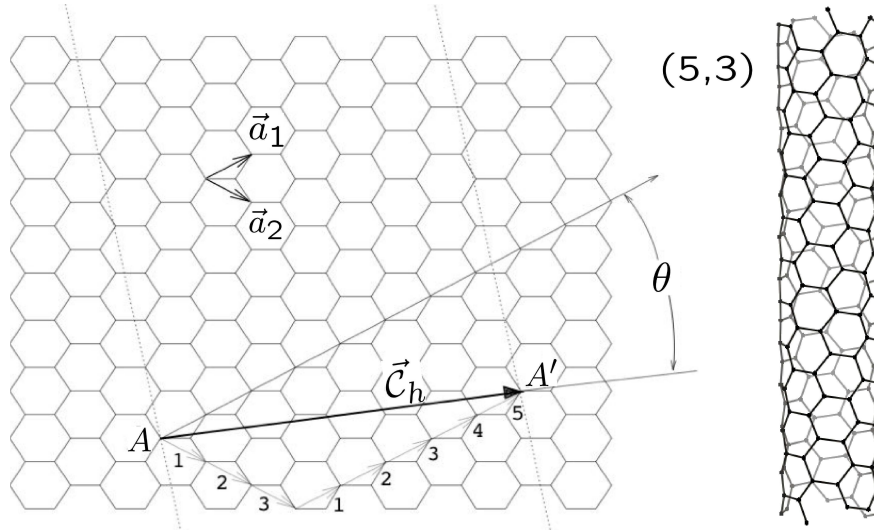


Fig. IV.3. Réseau hexagonal d'une feuille de graphène de base \vec{a}_1, \vec{a}_2 et construction du nanotube (5,3) (à droite) après enroulement suivant la direction chirale \vec{C}_h [12]

Soient deux points A et A' appartenant au réseau hexagonal du graphène généré par les vecteurs primitifs \vec{a}_1 et \vec{a}_2 (voir Fig. IV. 3). Le rôle du vecteur chiral \vec{C}_h consiste après enroulement de la feuille de graphène, à connecter ces deux points distincts ($\vec{C}_h = \overline{AA'}$) de telle sorte à les rendre cristallographiquement équivalents sur le contour circonférentiel du nanotube résultant. Dans ce cas, la géométrie du nanotube de carbone est complètement spécifiée à partir du couple d'entiers (n, m) , définissant la position relative du vecteur $\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$: Le diamètre d_t du tube est donné par l'expression

$d_t = |\vec{C}_h| / \pi = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2}$ où a est la constante du réseau hexagonal ($a = \sqrt{3}a_{cc}$ et

$a_{cc} = 1.42$ Å, est la longueur de la liaison C-C) tandis que l'angle chiral

$\theta = (\vec{C}_h, \vec{a}_1) = \frac{\vec{C}_h \cdot \vec{a}_1}{2\sqrt{n^2 + mn + m^2}}$ définit l'orientation des hexagones par rapport à l'axe du

tube. Les nanotubes $(n, 0)$ sont appelés les nanotubes zigzag du fait qu'ils présentent à leurs extrémités un chemin en zigzag. (Certaines liaisons C-C sont dans ce cas parallèles à l'axe du tube). Par ailleurs les nanotubes (n, n) (pour lesquels $\theta = (\vec{C}_h, \vec{a}_1) = 30^\circ$) sont appelés armchair du fait qu'ils présentent un contour sous forme de fauteuils au niveau de la circonférence du tube. (Certaines liaisons C-C dans ce cas sont perpendiculaires à l'axe du tube). Les tubes vérifiant le cas général $(n, m \neq n \neq 0)$ sont appelés chiraux (voir Fig. IV. 4).

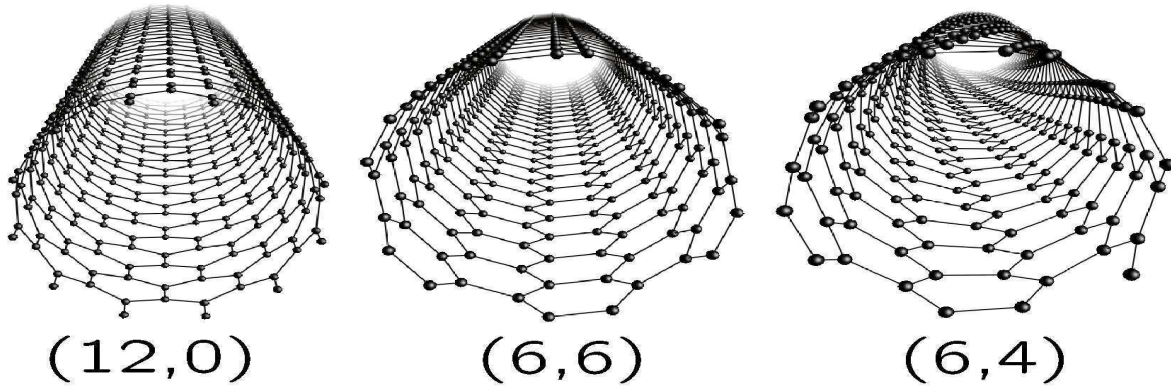


Fig. IV. 4. Structure géométriques des nanotubes : zigzag (12,0), armchair (6,6) et chiral (6,4) [12]

Quant à la direction longitudinale du tube, celle-ci est décrite par un vecteur de translation \vec{T} dont les composantes sont $(\frac{2m+n}{N_R})$ et $(-\frac{2n+m}{N_R})$ dans la base des vecteurs primitifs \vec{a}_1 et \vec{a}_2 et la direction est perpendiculaire au vecteur chiral \vec{C}_h (N_R désigne le plus grand diviseur commun entre $(2m+n)$ et $(2n+m)$). La longueur du vecteur de translation est exprimée par $t = |\vec{T}| = \sqrt{3}a\sqrt{n^2 + nm + m^2} / N_R$, alors que le nombre d'atomes de carbone par cellule élémentaire est déterminé par : $N_c = 4(n^2 + nm + m^2) / N_R$.

L'ensemble des ces paramètres structuraux relatifs à d'un nanotube (n,m) sont résumés sur le tableau IV.1.

Symbole	Nom	Formule	Valeur
a	Constante du réseau direct	$a = \sqrt{3}a_{c-c} = 2.46 \text{ \AA}$	$a_{c-c} = 1.42 \text{ \AA}$
\vec{a}_1, \vec{a}_2	Vecteurs de base du réseau direct	$\vec{a}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2} \right)$ $\vec{a}_2 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)$	
\vec{b}_1, \vec{b}_2	Vecteurs de base du réseau réciproque	$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right)$ $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1 \right)$	
\vec{C}_h	Vecteur chiral	$\vec{C}_h = (n, m) = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$	$0 \leq m \leq n$ (n, m) entiers
d_t	Diamètre du tube	$d_t = \vec{C}_h / \pi = \frac{a}{\pi} \sqrt{n^2 + nm + m^2}$	
θ	Angle chiral	$\sin \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + nm + m^2}}$ $\tan \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2n + m}$	$0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{6}$
\vec{T}	Vecteur de translation axial	$\vec{T} = (t_1, t_2) = t_1\vec{a}_1 + t_2\vec{a}_2$ $t_1 = \frac{2m + n}{N_R} ; t_2 = -\frac{2n + m}{N_R}$	$N_R = \text{gcd}(2m + n, 2n + m)$ (t_1, t_2) entiers
N_c	Nombre d'atomes de carbone par cellule élémentaire	$N_c = 4(n^2 + nm + m^2) / N_R$	

Table IV.1 : Paramètres structuraux d'un nanotube (n,m)[12]

2 Propriétés électroniques des nanotubes de carbone monofeuillets:

2.1 Du graphène aux nanotubes de carbone

Cette partie reprend les principales propriétés électroniques des nanotubes de carbone dérivant de celles du graphène. D'une manière générale, les atomes de carbone vérifient une hybridation planaire sp^2 dans le plan du graphène et fournissent aux nanotubes de carbone deux types de liaisons : Parmi les 4 orbitales de valences ($2s$, $2p_x$, $2p_y$ et $2p_z$ (Oz étant l'axe perpendiculaire au plan de la feuille de graphène), les orbitales s , p_x et p_y de chaque atome se couplent formant ainsi les orbitales planaires liantes σ et anti-liantes σ^* à caractère covalent. Quant aux orbitales p_z , perpendiculaires au plan xOy , le recouvrement entre plus proches voisins est à l'origine des orbitales liantes π et anti-liantes π^* , perpendiculaires au plan du graphène.

a- Description de la structure de bandes du graphène par la méthode des liaisons fortes

Une première approximation est l'étude des propriétés électroniques du graphène par la méthode des liaisons fortes, sur une base constituée d'orbitales p_z , dont l'interaction est restreinte seulement aux premiers plus proches voisins (Eq. IV. 3,4 et 5). La résolution de ce problème de valeurs propres présente l'avantage de se dérouler dans l'espace direct. Cette méthode est également généralisable aux solides non cristallins contenant des défauts et autres lacunes [13-22]

Le graphène est un réseau hexagonal bi-dimensionnel dont les vecteurs primitifs dans l'espace cartésien réel sont représentés par:

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{a}{2} \right) \text{ et } \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{a}{2} \right) \quad (\text{IV.1})$$

où $a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = 1.42 \text{ \AA}$ et les vecteurs de base dans l'espace réciproque sont définis par :

$$\vec{b}_1 = b \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \text{ et } \vec{b}_2 = b \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \quad (\text{IV.2})$$

correspondent à une constante de réseau $b = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$ dans l'espace réciproque (Fig. IV.5).

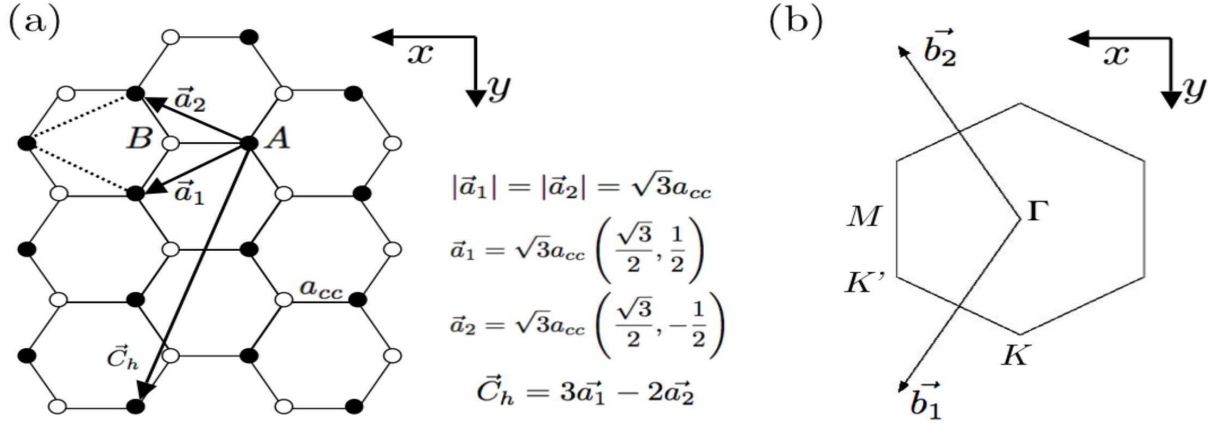


Fig. IV. 5 Représentation des vecteurs primitifs (\vec{a}_1, \vec{a}_2) de l'espace réel et (\vec{b}_1, \vec{b}_2) de l'espace réciproque [12]

Chaque atome A (ou B) étant défini uniquement par l'orbitale $\tilde{p}_z(\vec{r} - \vec{r}_A)$ (ou $\tilde{p}_z(\vec{r} - \vec{r}_B)$) dans l'approximation des bandes π , l'équation de Schrödinger est résolue en utilisant le théorème de Bloch. Sur la base de ces orbitales, la fonction d'onde globale s'écrit

$$\psi(\vec{k}, \vec{r}) = c_A(\vec{k}) \tilde{p}_z^A(\vec{k}, \vec{r}) + c_B(\vec{k}) \tilde{p}_z^B(\vec{k}, \vec{r}) \quad (\text{IV.3})$$

où

$$\tilde{p}_z^A(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\vec{k} \cdot \vec{l}} \tilde{p}_z(\vec{r} - \vec{r}_A - \vec{l}) \quad (\text{IV.4})$$

et

$$\tilde{p}_z^B(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\vec{k} \cdot \vec{l}} \tilde{p}_z(\vec{r} - \vec{r}_B - \vec{l}) \quad (\text{IV.5})$$

\vec{k} définit le vecteur d'onde tandis que N est le nombre de cellules dans la feuille du graphène et l identifie les atomes voisins. Le spectre d'énergie $E(\vec{k})$ est obtenu après résolution de l'équation séculaire :

$$\det (H - E(\vec{k})S) = 0 \quad (\text{IV.6})$$

où les matrices :

$$H = \begin{pmatrix} H_{AA} & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{2p} & \gamma_0 f(\vec{k}) \\ \gamma_0 f(\vec{k})^* & \varepsilon_{2p} \end{pmatrix} \quad (\text{IV.7})$$

et

$$S = \begin{pmatrix} S_{AA} & S_{AB} \\ S_{BA} & S_{BB} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & s_0 f(\vec{k}) \\ s_0 f(\vec{k})^* & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.8})$$

représentent respectivement la matrice hamiltonien et la matrice d'interaction telles que définies sur la cellule élémentaire contenant les deux atomes A et B premiers voisins (voir Fig. IV. 5 (a)). L'expression

$$f(\vec{k}) = 1 + e^{i\vec{k}\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\vec{a}_2} \quad (\text{IV.9})$$

traduit la somme des facteurs de phase, relatifs aux premiers plus proches voisinage. Dans les expressions (IV.7 et 8), ε_{2p} , γ_0 et s_0 définissent l'énergie du site p_z , les intégrales de transfert et de recouvrement entre premiers plus proches voisins des orbitales électroniques π respectivement. Ces paramètres caractéristique à la méthode des liaisons fortes, sont ajustés à partir de données expérimentales ou à partir de données ab-initio (voir Fig. IV.6). En général, $\varepsilon_{2p} = 0$, $-2.5 < \gamma_0 < -3.0$ eV et $s_0 < 0.1$ [21, 22]

L'ensemble des valeurs propres est déterminé par :

$$E^\pm(\vec{k}) = \frac{\varepsilon_{2p} \pm \gamma_0 \omega(\vec{k})}{1 \pm s_0 \omega(\vec{k})} \quad (\text{IV.10})$$

où

$$\omega(\vec{k}) = \sqrt{|f(\vec{k})|^2} = \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)} \quad (\text{IV.11})$$

Les signes + et - décrivent respectivement les bandes π liantes et anti liantes. Le spectre d'énergie correspondant $E(\vec{k})$ est représenté le long de la zone de Brillouin (Fig. IV.4): La figure est subdivisée en deux parties : une partie supérieure reproduisant de la courbe de dispersion de la bande anti liante π^* et une partie inférieure décrivant la bande liante π . Ces deux bandes sont dégénérées aux points de haute symétrie K et K' que traverse le niveau de

Fermi (E_F). L'apparition d'une bande interdite de largeur nulle à ces points d'intersection des bandes occupées (π) et non occupées (π^*) fait du graphène un semi-métal.

Dans le cas où l'orthogonalité des fonctions d'ondes est prise en considération ($s_0 = 0$), l'énergie propre dans le modèle des liaisons fortes est déterminée par la relation :

$$E(\vec{k}) = \pm \gamma_0 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)} \quad (\text{IV.12})$$

définissant ainsi les bandes π et π^* symétriques par rapport à l'énergie de Fermi (E_F) au point de haute symétrie Γ .

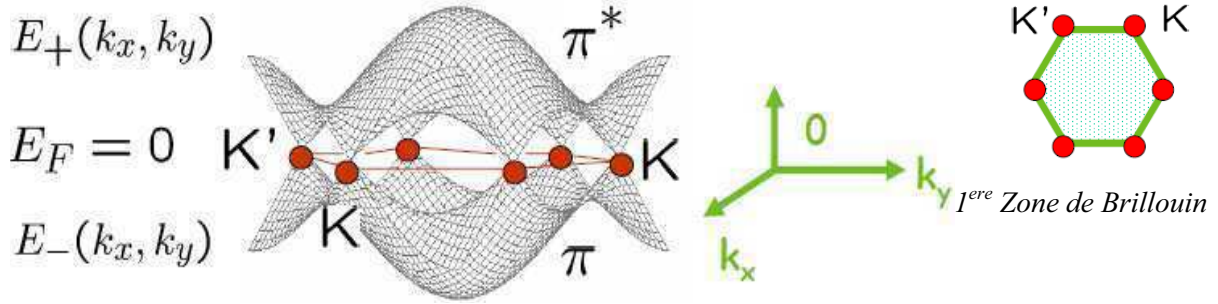


Fig. IV.4. Représentation de la structure de bandes et de la première zone de Brillouin [12]

L'expression analytique simple (Eq. IV.12) est l'avantage principal de cette approche se basant uniquement sur la contribution du premier plus proche voisin dans la structure de bandes des états électroniques π du graphène.

b- La méthode du repliement de zone

Contrairement à la valeur continue du vecteur d'onde axial sur le plan de graphène de longueur infini (suffisamment long) et faisant suite aux conditions de continuité cycliques le long de la circonférence du tube résultant :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{C}_h) = e^{i\vec{k}\vec{C}_h} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (\text{IV.13})$$

le vecteur d'onde du graphène se retrouve ainsi quantifié [12, 23] :

$$\vec{k}\vec{C}_h = 2\pi\nu \text{ (où } \nu \text{ est un entier)} \quad (\text{IV.14})$$

Vu que le graphène est métallique aux points de haute symétrie K et K' , le principe de la méthode du repliement de zone consiste à identifier la nature d'un nanotube (n,m) à partir des situations pour lesquelles la quantification du vecteur d'onde parallèle se superpose (ou pas) à la structure de bandes du graphène à ces points particuliers de haute symétrie [16,23]

Les nanotubes sont métalliques lorsque la condition :

$$n - m = 3l \quad (\text{IV. 15})$$

(où l est entier) est vérifiée. Dans le cas contraire, ces structures sont semi-conductrices, présentant une bande interdite dont la largeur

$$\Delta E_g \approx \frac{2 a \gamma_0 \pi}{\sqrt{3} |\vec{C}_h|} = \frac{2 a \gamma_0}{d_t \sqrt{3}} \quad (\text{IV. 16})$$

est inversement proportionnelle au diamètre du tube ($d_t = \frac{|\vec{C}_h|}{\pi}$). Pour des structures à diamètres suffisamment grand, la bande interdite se referme pour atteindre asymptotiquement le comportement métallique d'une feuille de graphène.

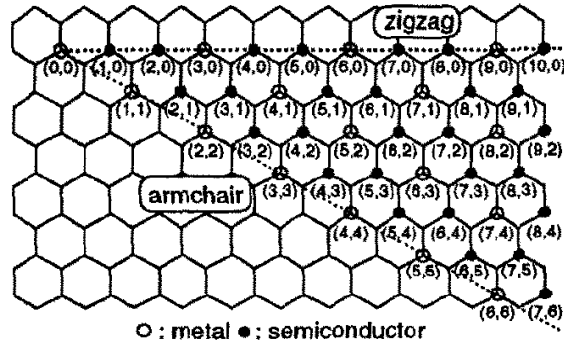


Fig. IV.5. Table des nanotubes métaux (en cercle vide) et semi conducteurs (en cercle plein)[23]

Sur la Fig. IV.5 est représenté un schéma définissant le type des nanotubes (n,m) conformément à la méthode du repliement de zone [23].

c- Aperçu sur la DFT et la base d'orbitales atomiques numériques

Basé sur la méthode de repliement de zone, le modèle des liaisons fortes à orbitales π a enregistré des divergences avec les mesures expérimentales de spectroscopie [22].

Afin de remédier à ces insuffisances dues essentiellement à la négligence des effets de courbure et à la considération de l'interaction uniquement avec les premiers plus proches voisins, la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) peut être utilisée [24,25]: Partant d'un problème à N corps, la DFT réduit l'équation de Schrödinger globale du système au comportement d'un électron dans un potentiel d'interaction effectif, dépendant de la densité électronique globale du système à l'équilibre. Ce potentiel moyen, non analytique, qui tient compte des détails quantiques de la structure est déterminé de manière auto-cohérente. Pour son développement, l'expression de ce champ d'interaction effectif dépend explicitement de la base des fonctions d'ondes utilisées.

Par ailleurs sachant que les fonctions d'ondes localisées sont convenables pour décrire des états atomiques quasi-liés, la décomposition de la fonction d'onde électronique globale du système sur une base de combinaison linéaire d'orbitales atomiques semble être suffisante pour la détermination de la structure de bandes. Or des difficultés de convergence et de transférabilité de la base peuvent apparaître, d'où la nécessité de l'ajustement systématique de ses éléments.

Dans le package SIESTA [26], des fonctions d'ondes localisées de type :

$$\phi_{lm,k}^i(\vec{r}) = \phi_{l,k}^i(r - R_i) Y_{lm}(r) \quad (\text{IV.17})$$

similaires à celles d'orbitales atomiques (obtenues à partir de produit d'harmoniques sphérique $Y_{lm}(r)$ par des fonctions radiales $\phi_{l,k}^i(r - R_i)$ centrées sur les positions atomiques R_i) sont considérées. L'indice i réfère à l'indice de l'atome, tandis que les indices l et m représentent les moments angulaires et magnétiques. Quant à l'indice k , ce dernier caractérise les différentes fonctions radiales $\phi_{l,k}(r)$, relatives au nombre quantique l . L'utilisation de plusieurs fonctions radiales correspondant au même moment angulaire définit la base

multiple ζ . Des rayons de coupure r_c , ajustables définissant l'extension spatiale de ces fonctions radiales, y sont associés [22]

La définition d'une supercellule contenant un défaut et sa reproduction périodique aboutit aussi à la détermination de la structure de bandes de systèmes non périodiques. L'effet du défaut est déterminé à partir de l'identification des éléments diagonaux de l'hamiltonien ab-initio correspondant aux atomes voisins. La description de la variation de l'énergie du site dans le voisinage immédiat du défaut définit le potentiel effectif généré par le défaut [21, 31-34].

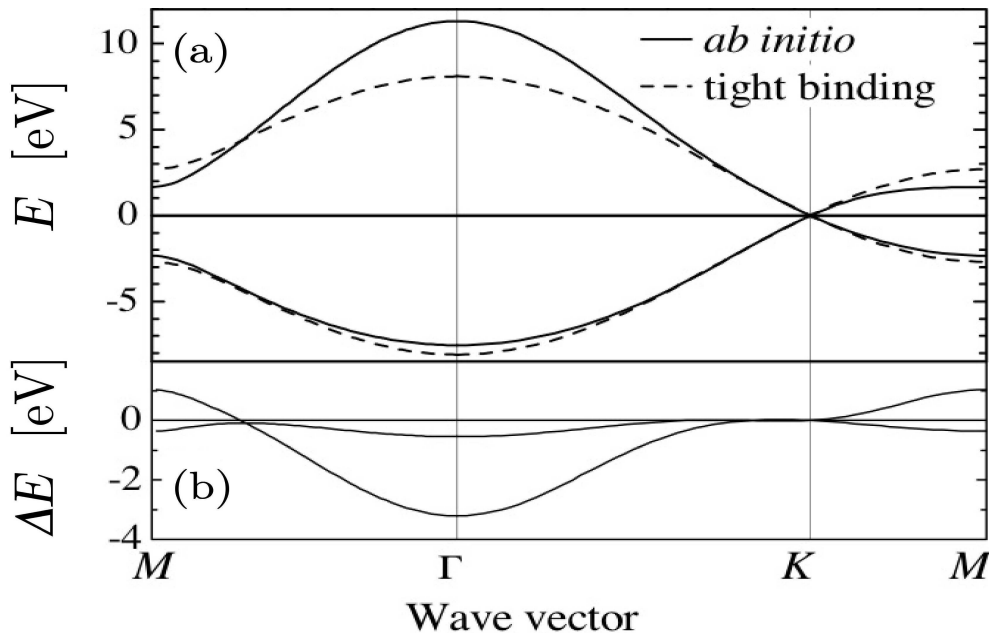


Fig. IV. 6. Limites du modèle des liaisons fortes des électrons π ($\gamma_0 = -2.7\text{eV}$ et $S_0 = 0$) devant la méthode de calcul ab-initio. $\Delta E(\text{eV})$ est l'erreur commise entre les deux méthodes de calcul [12,22].

Des équivalences peuvent s'effectuer entre différentes méthodes de calcul de structures de bandes à partir de la détermination de paramètres effectifs caractéristiques assurant le passage d'une méthode à une autre. A titre d'exemple, la fig. IV.6, montre une étude comparative entre l'approche ab-initio et la méthode des liaisons fortes ($\gamma_0 = -2.7\text{eV}$ et $S_0 = 0$). Au voisinage du point particulier de haute symétrie K du graphène, les deux modèles convergent [12, 22].

2.2 Propriétés de transport dans les nanotubes parfaits :

a- Approche de Buttiker-Landauer

Selon R. Landauer [27] et M. Büttiker [28], la conductance traduit la probabilité de transmission d'une charge électrique, depuis l'électrode émettrice (L) vers l'électrode réceptrice (R) considérées semi infinies, sous tension extérieure V (Fig. IV.7.a)

Disposant de canaux de transmission (d'indice n) dans la partie (C) du dispositif, le courant total I traversant la structure est déterminé par:

$$I = \int \sum_n T_n(E) f_R(E - E_F + eV) [1 - f_L(E - E_F)] I_{n^+}(E) dE + \int \sum_n T_n(E) f_L(E - E_F + eV) [1 - f_R(E - E_F)] I_{n^-}(E) dE \quad (\text{IV.18})$$

où $f_L(E)$ et $f_R(E)$ représentent les fonctions de distribution Fermi-Dirac des porteurs de charges au niveau des électrodes de gauche (L) et de droite (R) respectivement. $T_n(E)$ est le coefficient de transmission relatif à un état propre $\psi_n(E)$ appartenant au système (C). Les termes $I_{n^\pm} = \mp \frac{2e}{h}$ décrivent le courant par unité d'énergie des ondes progressives et régressives respectivement et E_F est l'énergie de Fermi.

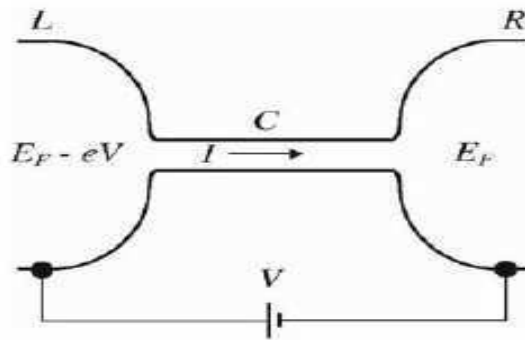


Fig. IV.7 a). Schéma représentant la connexion d'un fil quasi-unidimensionnel avec les électrodes émettrice (L) et réceptrice (R), sous tension extérieure V [12]

Pour un système unidimensionnel

$$I = \frac{2e}{h} \int \sum_n T_n(E) [f_R(E - E_F) - f_L(E - E_F + eV)] dE \quad (\text{IV.19})$$

A température nulle, le courant est donné par

$$I = \frac{2e}{h} \int_{E_F - eV}^{E_F} \sum_n T_n(E) dE \quad (\text{IV.20})$$

alors qu'à faible tension appliquée ($V \rightarrow 0$) (régime linéaire)

$$I = V \frac{2e^2}{h} \sum_n T_n(E_F) \quad (\text{IV.21})$$

Identifiée à partir de la loi d'Ohm $I = G.V$, la conductance G est donnée par l'expression :

$$G = G_0 \sum_n T_n(E_F) \quad (\text{IV.22})$$

où $G_0 = \frac{2e^2}{h} = 12.9 K\Omega$ est le quantum de conductance. Dans le cas de conducteurs parfaits, le transport est balistique $[(T_n(E_F))|_{n=1,M} = 1]$ pour tous les canaux de transmission comptabilisés uniquement pour les ondes progressives identifiées par les branches à vitesse de groupe $\frac{\partial E(k)}{\partial k} > 0$ dans la structure de bandes $E(k)$. En conséquence,

$$G = G_0 M \quad (\text{IV.23})$$

où M représente le nombre total de canaux. Le coefficient 2 dans l'expression de G_0 est lié à la dégénérescence de spin. Connue sous le nom de la formule de Landauer – Büttiker [27], Eq. IV.22 relie la conductance à la contribution de tous les canaux disponibles à la transmission.

b- Formalisme mathématique pour la transmission électronique dans les nanotubes de carbone - Méthode de la fonction de Green.

L'objectif de cette partie consiste à la détermination de la transmission électronique dans les nanotubes de carbone en utilisant le formalisme de Green [16,30]. Conformément à l'approche de Landauer-Büttiker [27], le nanotube considéré est subdivisé suivant les trois régions caractéristiques: L'émetteur (L), le système (C) et le collecteur (R).

Partant du hamiltonien H de toute la structure, la fonction de Green globale G obéit à l'équation :

$$(\varepsilon - H) G = I \quad (\text{IV. 24})$$

où l'énergie $\varepsilon = E + i\eta|_{\eta \rightarrow 0}$ est calculée dans le plan complexe et I représente la matrice identité.

La projection de cette équation sur les sous-espaces relatifs à chaque région caractéristique (L, C et R), permet de subdiviser les matrices globales H et G en autant de sous hamiltoniens locaux H_L , H_C et H_R et de définir autant de fonctions de Green locales g_L , g_C et g_R conformément à l'équation :

$$\begin{pmatrix} g_L & G_{LC} & G_{LCR} \\ G_{CL} & g_C & G_{CR} \\ G_{LRC} & G_{RC} & g_R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\varepsilon - H_L) & h_{LC} & 0 \\ h_{LC}^+ & (\varepsilon - H_C) & h_{CR} \\ 0 & h_{RC}^+ & (\varepsilon - H_R) \end{pmatrix}^{-1} \quad (\text{IV.25})$$

Les matrices h_{LC} et h_{CR} sont les matrices de couplage entre ces éléments alors que G_{LC} et G_{CR} sont les fonctions de Green correspondantes (Fig. IV.7 b)

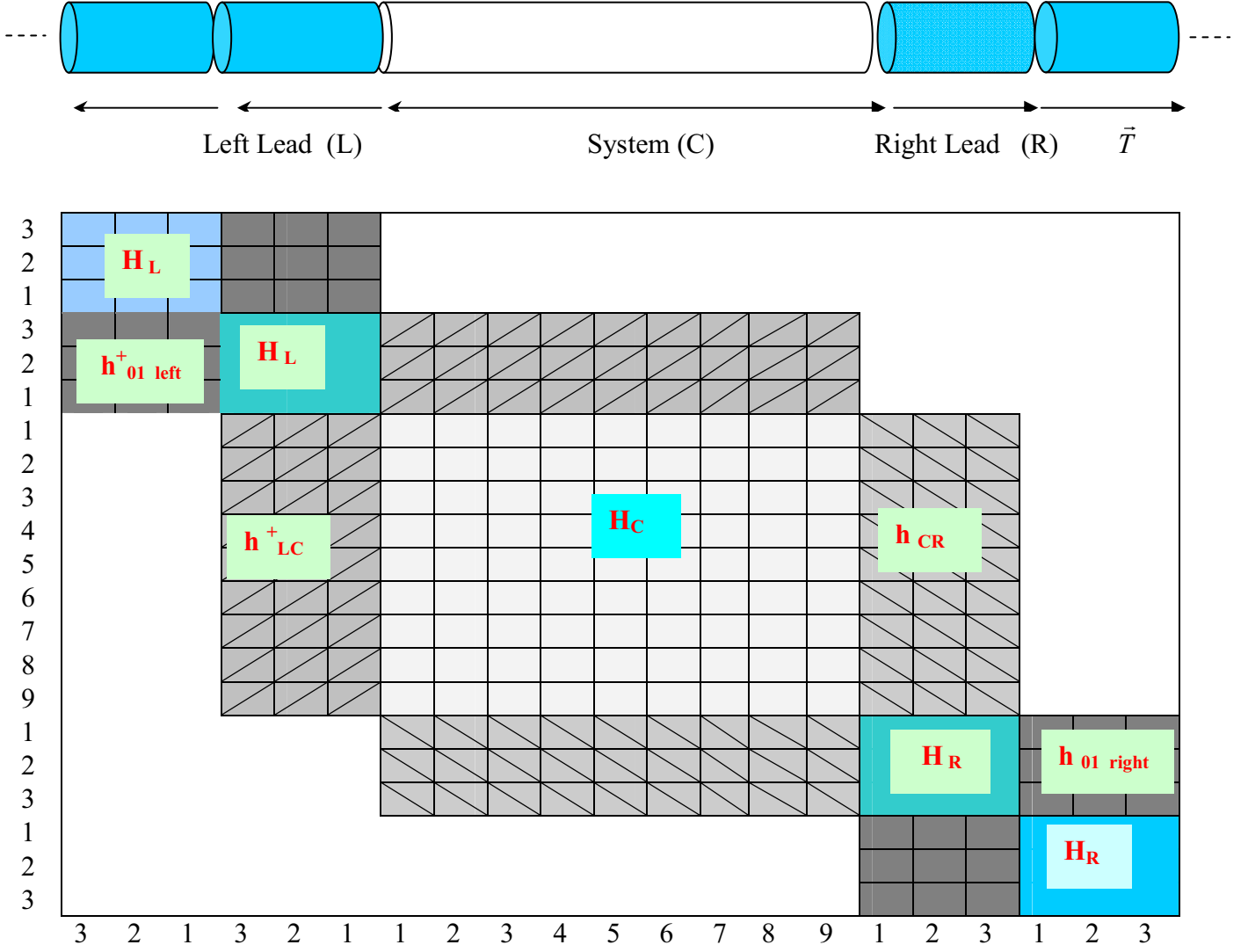


Fig. IV.7 b) Subdivision du nanotube de carbone suivant les trois régions caractéristiques L, C et R. Découpage de l'hamiltonien global H conformément à chaque région. \vec{T} étant le vecteur de translation de la supercellule correspondante.

En présence de couplage entre le conducteur (C) et les deux électrodes, le système d'équation IV.25, impose à la fonction de Green g_C du conducteur de s'écrire :

$$g_C = (\epsilon - H_C - \Sigma_L - \Sigma_R)^{-1} \quad (\text{IV.26})$$

en fonctions des self-énergies

$$\Sigma_L = h_{LC}^{+} g_L h_{LC} \quad \text{et} \quad \Sigma_R = h_{RC} g_R h_{RC}^{+} \quad (\text{IV.27})$$

et des fonctions de Green locales

$$g_{L,R} = (\varepsilon - H_{L,R})^{-1} \quad (\text{IV.28})$$

correspondant aux électrodes de gauche (L) et de droite (R) respectivement. L'effet du couplage nécessaire à la description effective des conditions de continuités à travers les interfaces C / R et C / L est considéré à travers les matrices de couplage $\Gamma_{L,R}$:

$$\Gamma_{L,R} = i \left[\Sigma_{L,R}^r - \Sigma_{L,R}^a \right] \quad (\text{IV.29})$$

pour lesquelles $\Sigma_{L,R}^a$ est le conjugué hermétique de $\Sigma_{L,R}^r$. La probabilité de transmission depuis l'émetteur (L) au collecteur (R) est donnée par la fonction de transmission (notée T). Celle-ci est obtenue à partir de :

$$T = \text{Tr} \left[\Gamma_L g_C^r \Gamma_R g_C^a \right] \quad (\text{IV.30})$$

Tr symbolise la trace de la matrice et $g_C^{r,a}$ sont les fonctions de Green retardée et avancée du conducteur [16].

De même, connaissant g_c , la densité d'état $N(E)$ est obtenue à partir de :

$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} (\text{Tr} (g_C(E))) \quad (\text{IV. 31})$$

permettant ainsi d'accéder aussi à la densité spectrale des états électroniques dans le conducteur (C). La difficulté de cette procédure numérique se situe dans la détermination des fonctions de Green $g_{L,R}$ des électrodes semi-infinies [29,30]. Une méthode appropriée pour le calcul des matrices self-énergies correspondantes est présentée dans l'annexe IV [30] d'où l'intérêt d'identifier les hamiltoniens $h_{0l \text{ right}}$ et $h_{0l \text{ left}}$.

2.3 Description des propriétés de transport dans les nanotubes parfaits : Cas des nanotubes (10,10) métallique et (17,0) semi-conducteur

L'objectif de cette partie est de décrire les propriétés de transport dans deux nanotubes parfaits : armchair (10,10) et zigzag (17,0) (dont les représentations géométriques sont données sur les Figs. IV.8 (a) et (b) respectivement) et de vérifier les correspondances susceptibles d'apparaître entre les propriétés structurales et électroniques de ces matériaux.

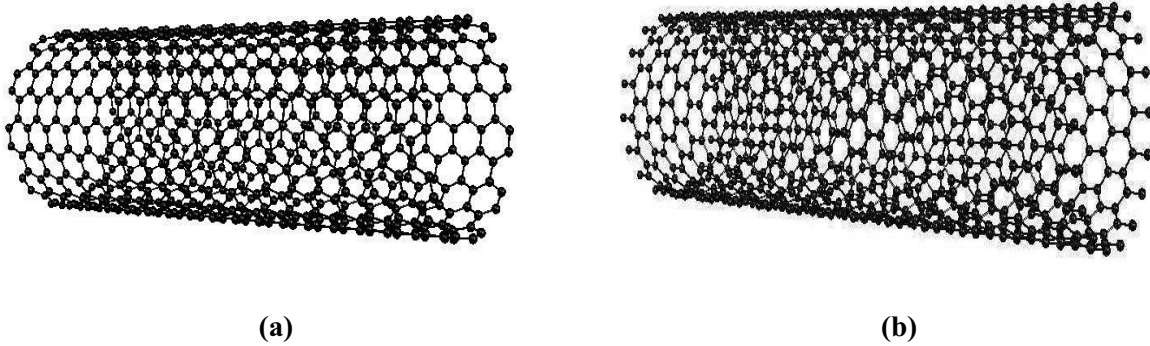


Fig. IV. 8 Nanotubes : a) armchair (10,10) et b) zigzag (17,0). Les structures présentent le nombre d'atomes $N_c = 40$ et $N_c = 68$ par maille élémentaire et les diamètres $d_t \approx 13.53 \text{ \AA}$ et $d_t \approx 13.24 \text{ \AA}$ respectivement.

Les structures de bandes obtenues par la DFT-LDA à partir de supercellules sont représentées sur la Fig. IV. 9: Le comportement métallique du (10,10) est mis en évidence par la présence d'un croisement de bandes à l'énergie de Fermi. Quant au nanotube (17,0), une bande interdite de largeur $\Delta E_g \approx 0.55 \text{ eV}$ apparaît sur la structure de bandes (Fig. IV. 9 (b)). La nature de ces nanotubes est conforme aux prédictions de la méthode de repliement de zone (Eq. IV. 15). A noter que dans ce calcul, la contribution des excitons et des corrélations électroniques n'est pas prise en considération.

Combinés à ces hamiltoniens ab-initio, le formalisme de la fonction de Green est utilisé (conformément à la représentation apparue sur la Fig. IV. 7) pour déterminer numériquement le coefficient de transmission (mesuré en quanta de conductance $G_0 = \frac{2e^2}{h}$). Les nanotubes de carbone (10,10) et (17,0) parfaits sont examinés.

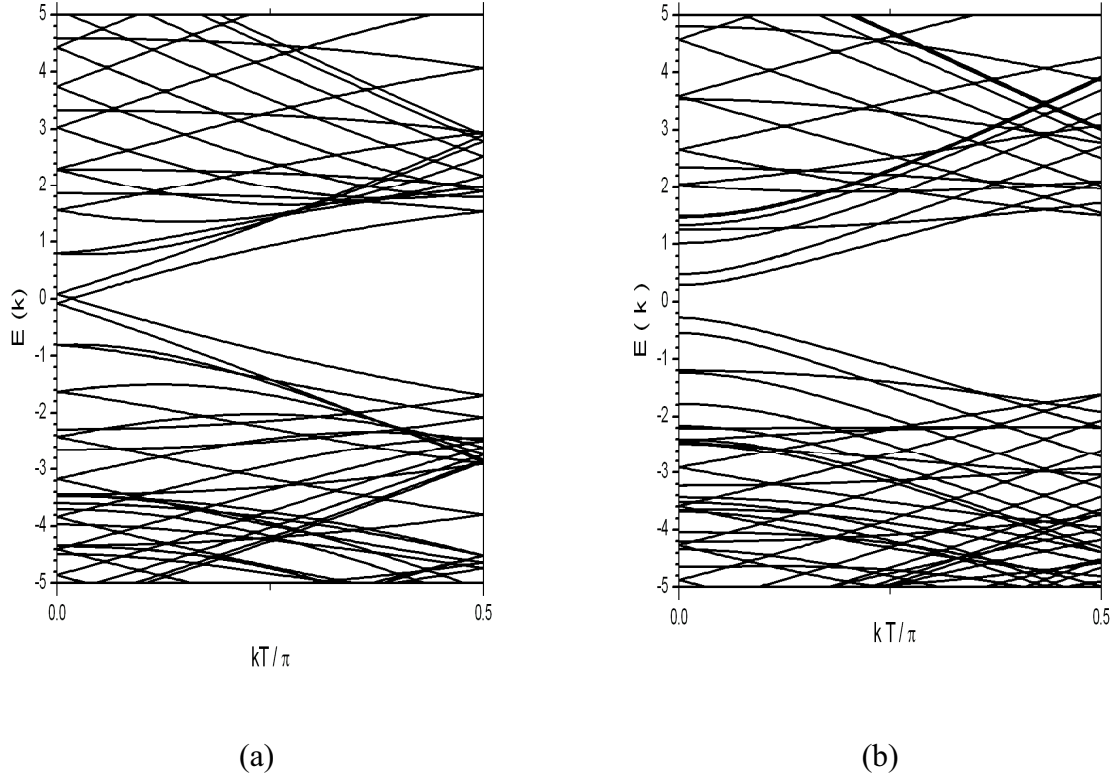


Fig. IV. 9 Structure de bandes établies par la DFT: a) du nanotube (10,10) et b) du nanotube (17,0). Des supercellules de 3 périodes et de 2 périodes étant considérées pour le (10,10) et le (17,0) respectivement. T est le vecteur de translation correspondant dans chaque structure.

Les profils de la transmission des nanotubes parfaits (10,10) (Fig. IV.10 (b)) et (17,0) (Fig. IV.11 (b)) apparaissent sous forme de fonction escalier dont la hauteur du palier correspond au nombre de canaux balistiques disponibles dans chaque structure. Ceci conforme à l'approche de Büttiker –Landauer pour les structures parfaites (Eq. IV. 24).

De même, sur les Fig. IV. 10(c) et 11(c), la densité d'état $N(E)$ en fonction de l'énergie E situe les singularités de Van Hove en accord avec condition de l'annulation de la vitesse de groupe $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k} = 0$ dans la structure de bandes $E(k)$. Aussi, l'absence de la transmission ($T(E) = 0$) à l'intérieur de la bande interdite du (17,0) est équivalente à l'absence de modes de transmission ($N(E) = 0$) appartenant à ce domaine d'énergie.

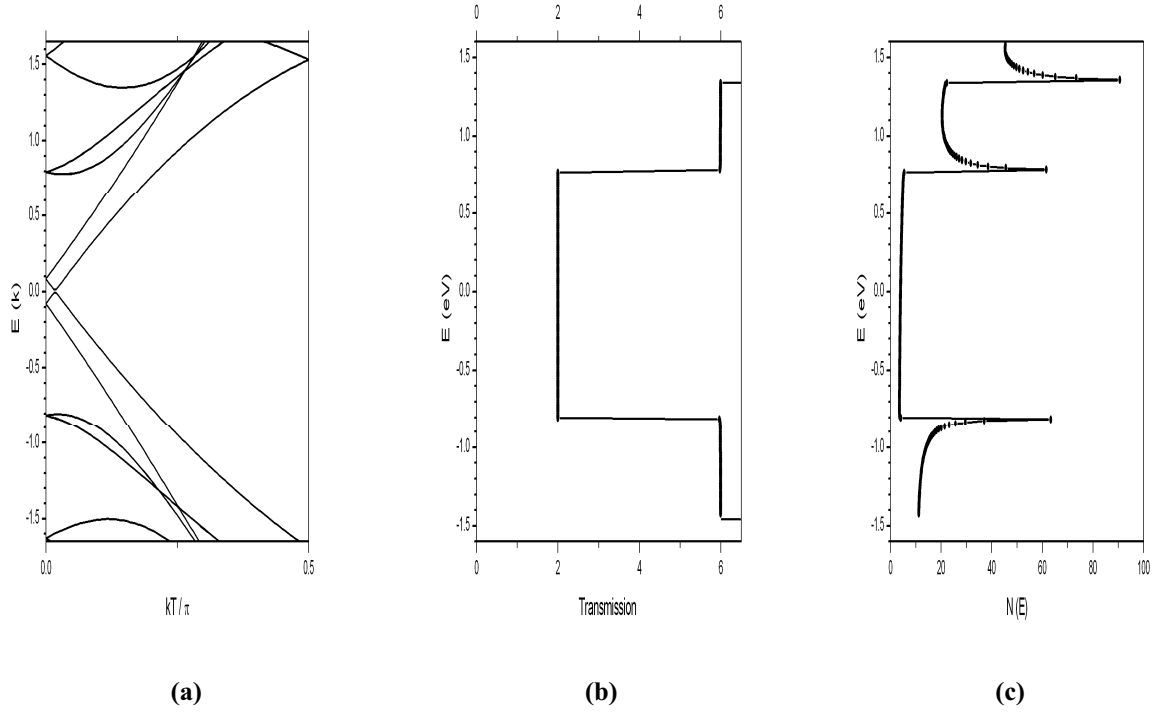


Fig. IV.10. Pour un nanotube (10,10) parfait : b) Conductance et c) Densité d'état calculés par le formalisme de la fonction de Green conformes à la structure de bandes établie par la méthode ab-initio (a)

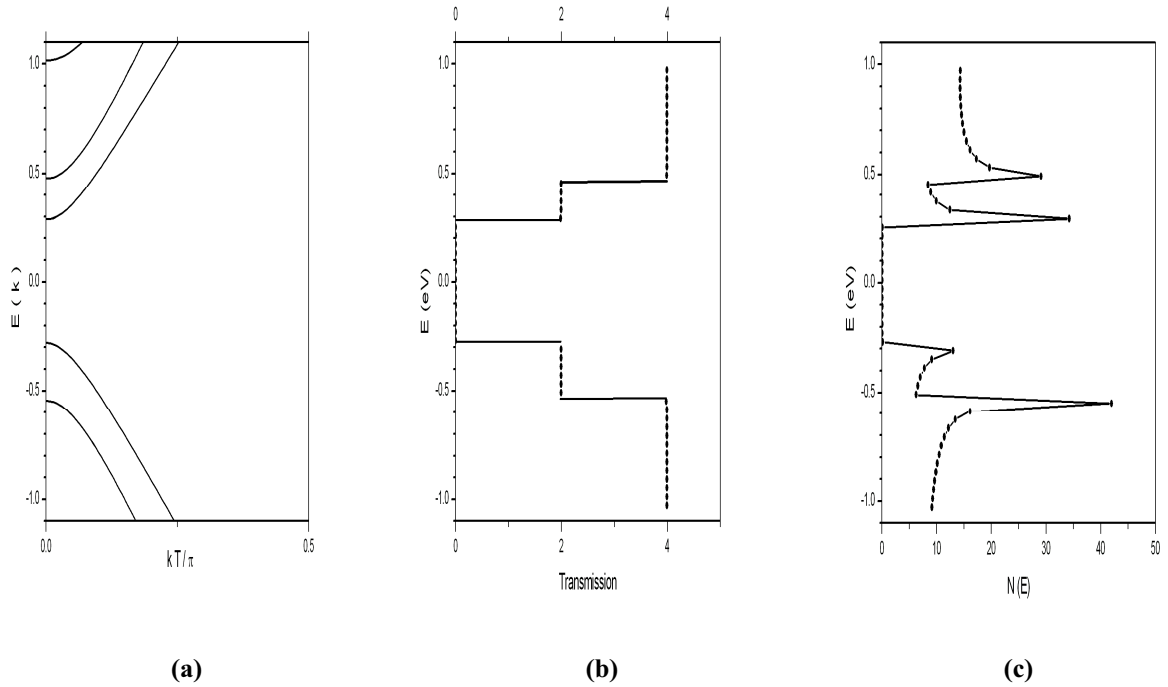


Fig. IV.11. Pour un nanotube (17,0) parfait : b) Conductance et c) Densité d'état calculés par le formalisme de la fonction de la fonction Green conformes à la structure de bandes établie par la méthode ab-initio (a)

II. Etude des propriétés de transport dans les nanotubes de carbone à dopage de substitution

La modification des propriétés intrinsèques des nanotubes de carbone par traitement chimique adéquat constitue une clé intéressante dans l'ingénierie des nanomatériaux. L'insertion de défauts dans la pristine par intercalation, encapsulation, substitution chimique ou fonctionnalisation covalente provoque des changements dans les propriétés fonctionnelles de ces dispositifs et fournit au système un moyen pratique pour la maîtrise du phénomène de transport quantique dans ces nanomatériaux désordonnés [31-44] : En général , introduire un défaut dans le nanotube de carbone propre, revient à perturber la structure électronique du réseau hôte et affecter les propriétés de diffusion des ondes propagatrices à travers les états défauts quasi-liés correspondants [36,37]. L'apparition du phénomène de la rétrodiffusion dans ces structures, diminue le coefficient de transmission à des énergies particulières relatives au type du défaut et provoque ainsi un confinement des ondes électroniques dans le nanotube de carbone [21,31-34, 42,43].

Les influences du taux de désordre et des types de défauts sont d'une pertinence fondamentale dans les propriétés de transmission dans les systèmes mésoscopiques [21,31-43]. Dans le cas de dopage à substitution en Bore (B) (ou Azote (N)), la corrélation des paramètres liaisons fortes sur des données ab-initio a permis une description effective des propriétés de transfert de charge dans ces nanotubes dopés [21]. En se basant sur la méthode du repliement de zone, les profils de transmission et les mécanismes de diffusion correspondants ont été décrits à des énergies différentes du spectre de transmission de nanotubes désordonnés de longueurs mésoscopiques. L'installation de la localisation d'Anderson au plus proche voisinage des énergies caractéristiques des états défauts quasi-liés a été clairement démontrée [21,32]. Dans le même contexte, la réduction de la rétrodiffusion dans les nanotubes de carbone dopés au Potassium (K) par rapport à celle de l'Azote (N) a été également interprétée à partir de paramètres effectifs déduits du graphène [32].

La même approche a été utilisée pour vérifier un accord quantitatif entre le libre parcours moyen et la longueur de localisation des ondes électroniques dans ces structures dopés par substitution (N). L'application d'un champ magnétique externe, perpendiculaire à l'axe du nanotube a constitué un moyen supplémentaire pour le contrôle des propriétés de

transport à travers l'ajustement convenable de l'énergie de l'état défaut par rapport à celle du niveau de Fermi [33].

L'étude a été étendue à la description statistique de la conductance quantique dans ces systèmes mésoscopiques désordonnés. Un accès supplémentaire sur la nature des ondes électroniques dans les différents régimes de transport a été fourni par l'examen du comportement d'échelle de la conductance et du libre parcours moyen [31,34]. Les résultats obtenus sont conformes aux premiers travaux sur la localisation d'Anderson dans les nanotubes de carbone [41-42].

En complément à ces travaux précédents, nous proposons d'étudier les propriétés de transport de nanotubes dopés par substitution B et / ou N, obtenues à partir des paramètres *ab-initio* tirés directement des structures tubulaires. Nous commençons par évoquer le problème de diffusion à une impureté individuelle B (N) dans le nanotube de carbone (10,10) afin d'identifier l'origine des minimas de conductance apparus dans les réponses de transmission.

Par la suite, et conformément aux chapitres précédents de ce travail, une corrélation particulière à courte portée entre défauts B et N est considérée dans ces structures. L'effet du dopage simultané en B et N dans les nanotubes de carbone est examiné en fonction de la distance séparatrice entre défauts B et N dans la paire BN. En s'inspirant du modèle à paramètres effectifs de C. Adessi et al. [33], une interprétation quantique est présentée pour décrire les réponses de la transmission relatives aux différentes configurations de la paire B-N. Un comportement similaire à celui de la pristine est montré pour le défaut particulier dimère BN.

Nous nous intéressons aussi au cas d'amas BN, sous forme de monodomains, dont l'extension spatiale évolue le long de la circonférence du nanotube jusqu'à formation de couronnes BN complètes. L'effet de l'orientation du monodomaine dans le nanotube hôte est évoqué et les réponses de la transmission de ces nano-défauts BN sont décrites en fonction du nombre d'atomes B(N) constituant l'amas BN.

Finalement, nous avons étudié des systèmes de couronne BN séparées par une ou plusieurs périodes du réseau de la structure hôte. Des résonances de transmission (semblables à celles de la résonance dimère dans les systèmes mécaniques et optiques) apparaissent dans le spectre de transmission de ces dispositifs.

Une conclusion résume l'ensemble des résultats obtenus.

a. Problème de diffusion à une impureté dans les nanotubes de carbone : cas du dopage en substitution à l'Azote (N) (ou Bore (B)) :

Considérons une supercellule d'un nanotube parfait (10,10) dans laquelle un atome de carbone (C) est chimiquement substitué par un atome d'Azote (N) (ou de Bore (B)) (Fig. IV.12.a).

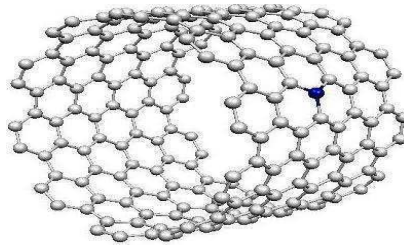


Fig. IV. 12 a) Dopage par substitution chimique d'un atome de carbone (C) par un atome d'Azote (N) dans une supercellule de 5 périodes d'un nanotube (10,10)

Cette structure dont l'ordre est perturbé par l'incorporation du défaut N (B) doit être suffisamment longue pour éviter au dopant d'influer sur l'ordre parfait du collecteur (R) et de l'émetteur (L). Ces éléments doivent être distants d'au moins de 10\AA , de part et d'autre du défaut N (B) (dont la position est prise comme origine). Sur la Fig. IV. 12 (b), est illustré le comportement du paramètre ab-initio énergie du site $E(p_{zi}|_{i=1,2})$ de la structure dopée par rapport à celle du nanotube propre. (les indices $i=1,2$ indiquent le type de représentation : simple ζ (pour $i=1$) et double ζ (pour $i=2$)). L'ordre est quasiment préservé au delà de cette distance caractéristique (10\AA) tandis qu'au voisinage du dopant, $E(p_z)$ se présente sous une forme gaussienne, centrée sur la position du dopant (Fig. IV. 12 (b)). Le potentiel effectif généré par la présence du défaut N (B) sous forme d'un puits de potentiel (une barrière de potentiel) identifiée dans le nanotube de manière similaire à celle utilisée dans le graphène [31-34].

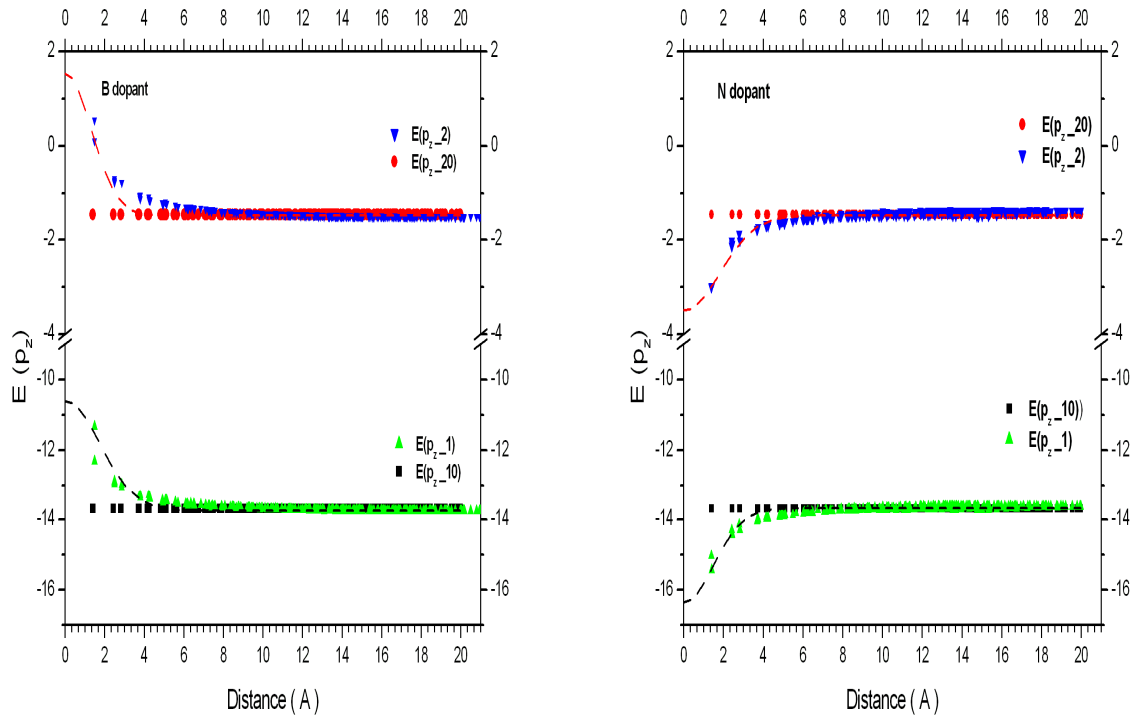


Fig. IV. 12 b) Le profil du potentiel effectif généré par l'état défaut du Bore (à gauche) et celui de l'Azote (à droite)) sous forme de barrière de potentiel et de puits quantique, respectivement. Les Energies des sites $E(p_z_1)$ et $E(p_z_2)$ sont données en simple et double ζ et tirées directement de l'hamiltonien du nanotube (10,10). Les lignes discontinues représentent l'allure Gaussienne de ces potentiels effectifs, centrés sur la position du dopant (prise comme origine).

Une représentation tridimensionnelle de ces potentiels effectifs est également décrite sur la Fig. IV. 12 (c) en fonction de la direction axiale (donné en nombre de périodes) et de la direction chirale (indiquée par l'indice de l'atome dans la cellule élémentaire). L'effet de courbure considéré dans le (10,10) montre une légère anisotropie dans la forme gaussienne. Celle-ci est plutôt avantagée dans la direction transversale.

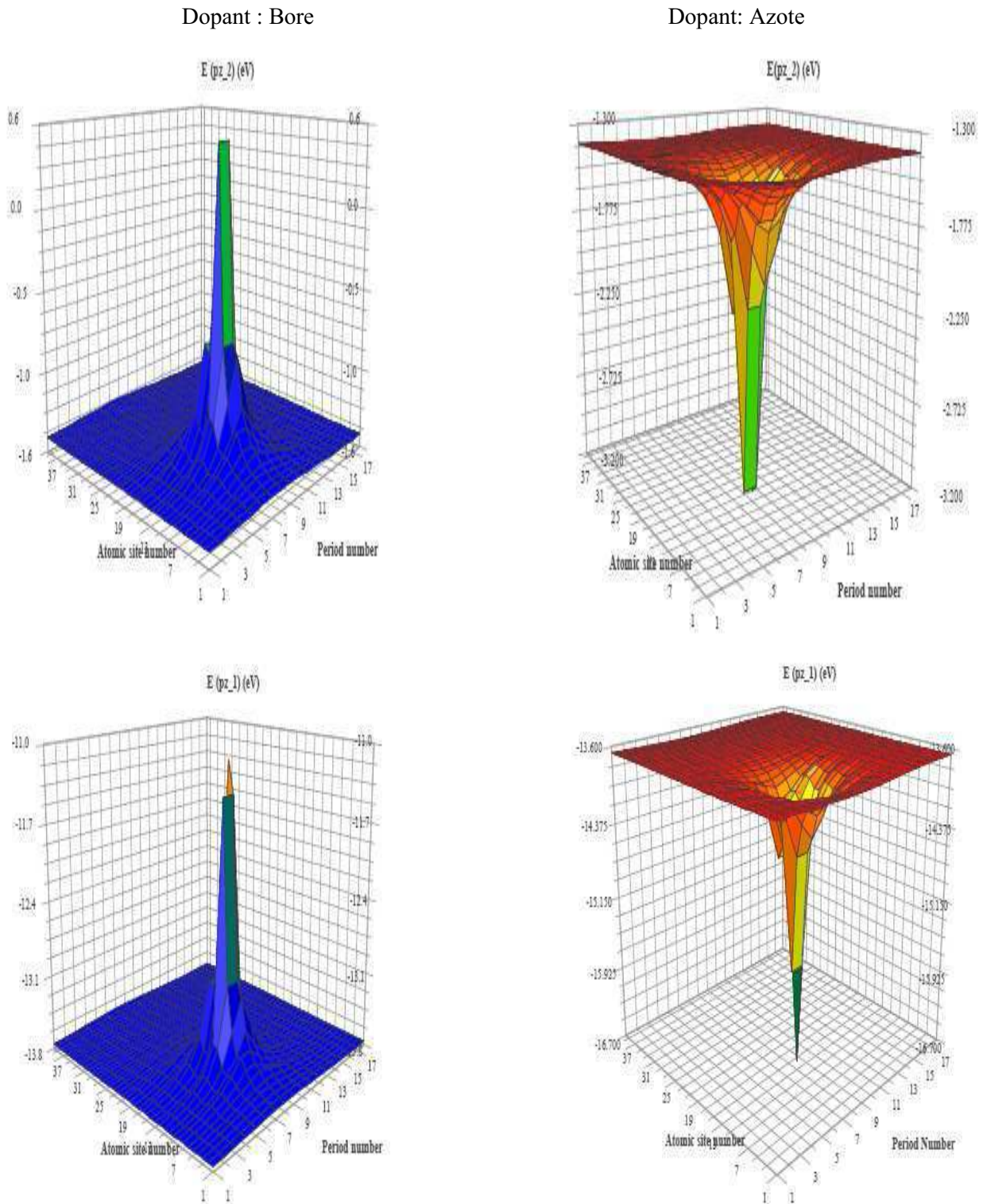


Fig. IV. 12 c) la représentation tridimensionnelle du profil du potentiel effectif généré par le Bore (l'Azote) Bore) en substitution sous forme de barrières de potentiel (de puits quantiques) asymétriques (pour $E(p_{z_1})$ et $E(p_{z_2})$).

La réponse de la transmission de ces structures en présence du dopage de substitution chimique N (ou B) est présentée sur la figure IV.11 (c): En détruisant la symétrie de translation du nanotube parfait, l'Azote (le Bore) provoque (en tant que défaut) l'apparition de minimas dans le profil de la transmission de l'ordre du quantum de conductance ($G/G_0 = 1$) dans la bande de conduction (π^*) (valence(π)).

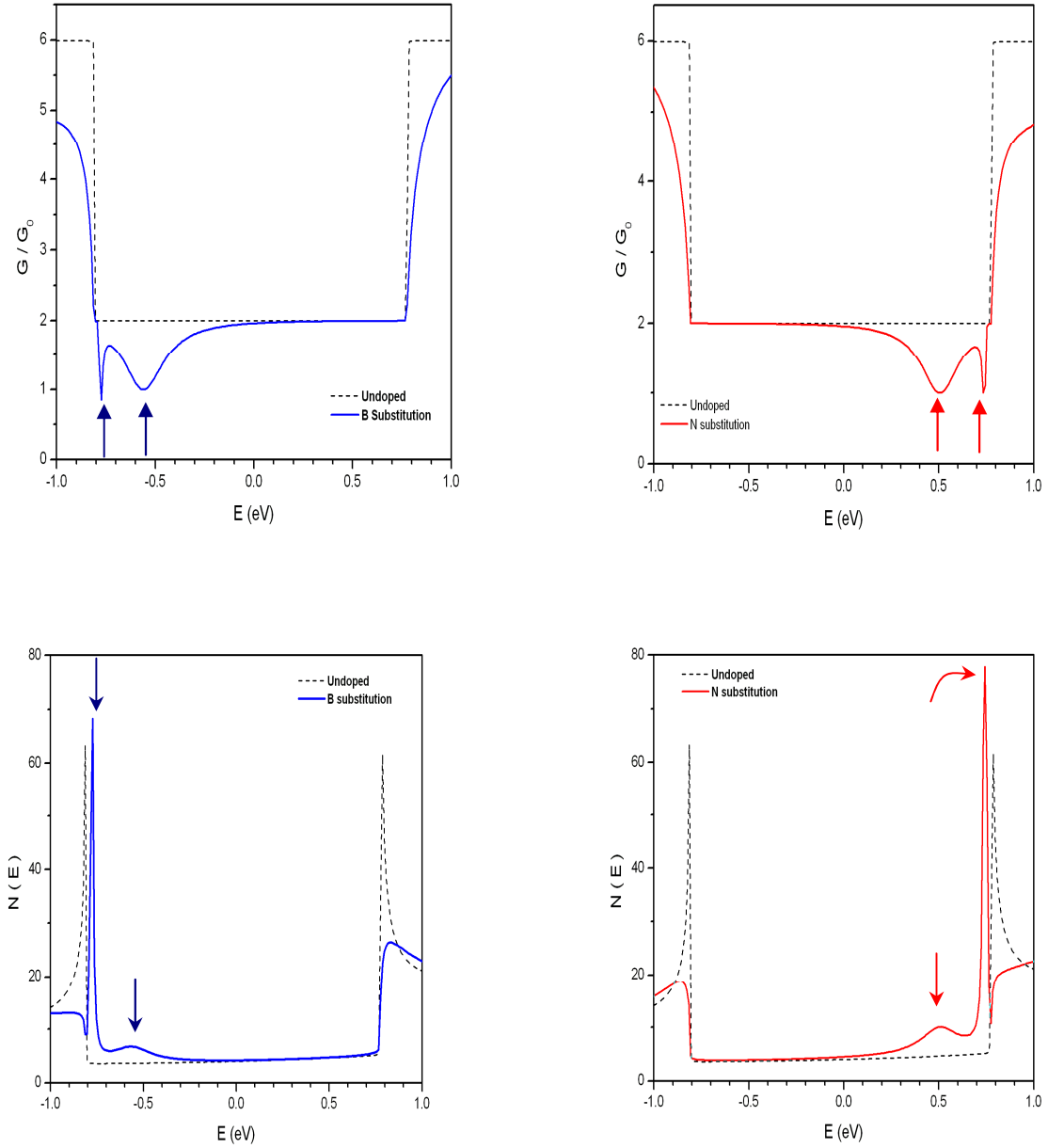


Fig. IV. 12 d) Les profils de la conductance et de la densité d'état $N(E)$ en substitution chimique d'un atome de carbone (C) par un atome d'Azote (N) (de Bore (B)).

Le dopant introduit deux états défauts quasi-liés de parités définies, directement responsables du mécanisme de la rétro-diffusion élastique [36]: Le premier état pair, à l'origine de la résonance large se situe au voisinage de $E \approx 0.50 \text{ eV}$ ($E \approx -0.60 \text{ eV}$ pour le Bore), tandis que le second état impair responsable de l'apparition de la résonance fine avoisinant $E \approx 0.75 \text{ eV}$ ($E \approx -0.78 \text{ eV}$ pour le Bore) est plus proche de la singularité supérieure (inférieure) de Van Hove [31-34,36].

L'apparition du potentiel effectif, généré par le défaut quantifie les états défauts à l'intérieur du puits de potentiel pour l'Azote et de la barrière de potentiel pour le Bore. Ceci nous amène à identifier l'origine quantique des états défauts quasi-liés responsables de la rétro-diffusion élastique dans les nanotubes dopés N (B). Les minima de conductance dans le profile de transmission se situent exactement aux niveaux de l'énergie des états quasi liés défauts introduits par les dopants (voir profile $N(E)$ sur Fig. IV.12 (d)) [21].

b. Propriétés de transport des nanotubes de carbone co-dopés à l'Azote (N) et au Bore (B)

L'étude précédente sur la simple substitution B (ou N) a montré les effets de dopage B (ou N) sur les propriétés de transmission dans un nanotube métallique (10,10). Par ailleurs, le dopage simultané en B et N à différents arrangements relatifs des atomes B, N et C a été examiné dans certaines structures inhomogènes $B_xC_yN_z$, telles que BC_4N , BC_2N ou $B_3C_2N_3$ [45-47]. L'étude de l'énergie de formation de telles structures, a démontré la tendance à la ségrégation des atomes B et N en se regroupant sous forme d'amas BN dans la structure hôte de carbone [48-50]

L'objectif de notre travail consiste à examiner l'effet d'un dopage simultané en B et N (pour lequel un atome B et un atome N sont disposés de manière intentionnelle dans le nanotube) sur le transport électronique. Une corrélation de désordre à courte portée entre les deux défauts B et N est donc considérée donnant lieu à plusieurs configurations possibles de co-dopages (dopages simultanés) B-N : Du simple motif appelé dimère BN, en passant par des domaines d'hexagones (construits par des assemblages en dimères B-N), les propriétés de transport relatives aux amas monodomaines B-N sont examinées. Les nanotubes hôtes considérées sont le (10,10) et le (17,0) [51].

a- Le problème de diffusion à une paire BN dans le nanotube de carbone

Considérons la paire BN par la présence simultanée d'un défaut B et d'un défaut N, en substitution à deux atomes de carbone dans un nanotube parfait. Les électrodes de gauche et de droite sont suffisamment éloignées de telle sorte que leurs ordres respectifs ne soient pas affectés par la présence simultanée de ces deux défauts.

Plusieurs configurations de la paire de défauts B-N sont examinées en fonction de la distance séparant l'atome B de l'atome N: Le motif défaut dimère B-N est construit à partir d'un voisinage B-N de premiers plus proches voisins (Figs. IV.13 (b) et (g)). Dans la structure BCCN, deux atomes de carbone séparent les défauts B et N ((Figs. IV.13 (c) et (h)). Quant à la structure défaut BN diamétralement opposée, les atomes B et N appartenant à la même période du nanotube, sont symétriquement disposés par rapport à l'axe central du tube (Figs. IV.13 (d) et (i)). Les propriétés de transmission de la simple substitution N (Figs. IV.13 (a) et (f)) et du motif NBN (Figs. IV.13 (e) et (j)) sont également illustrées à des fins de comparaison.

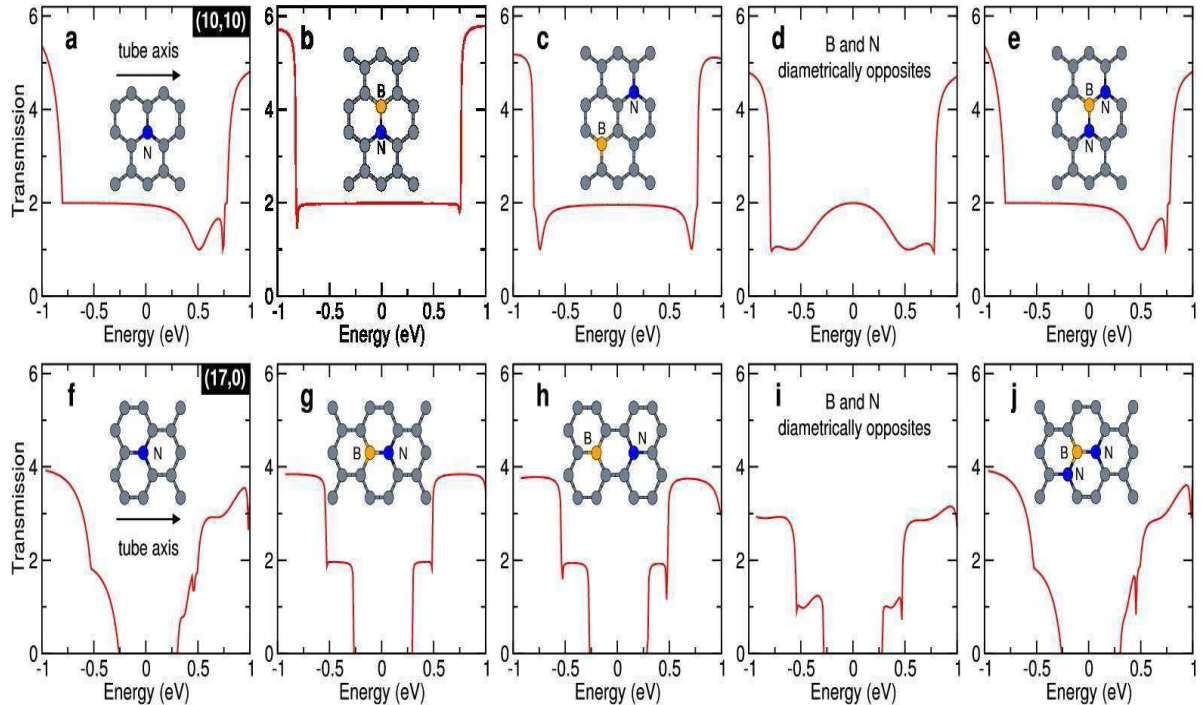


Fig. IV.13. Conductance calculée pour le nanotube métallique (10,10) (partie supérieure) et le nanotube semi-conducteur (17,0) (partie inférieure) contenant différents co-dopages BN. Les cas de la simple substitution N ((a) et (f)) sont introduites comme référence. Une comparaison directe est aussi établie avec la structure NBN ((e), (j)).

Contrairement à la simple substitution en N (B), le dimère BN présente un profil de transmission symétrique par rapport au niveau de Fermi (Figs. IV.13 (b), (g))). La réponse en paliers de la conductance est équivalente à celle des nanotubes parfaits métalliques et semi-conducteurs (Figs. IV.9(c), 10(c))), suggérant un régime de transport similaire au régime balistique du nanotube parfait. Par contre, au voisinage des singularités de Van Hove de faibles diminutions de la conductance persistent aussi bien pour le (10,10) que le (17,0).

L'augmentation de la distance séparatrice entre le défaut B et le défaut N dans la configuration BCCN a tendance à accentuer l'effet de la rétrodiffusion à travers ce type de défaut. Sans pour autant perturber sérieusement la réponse balistique de la pristine au voisinage du niveau de Fermi, les deux minima de conductance (qui sont plus profonds et plus larges par rapport au cas précédent du dimère BN) s'attirent vers le niveau de Fermi. Afin d'expliquer ce comportement, nous avons réexaminé de nouveau l'allure du potentiel effectif généré par chaque défaut B-N (voir Fig. IV. 14).

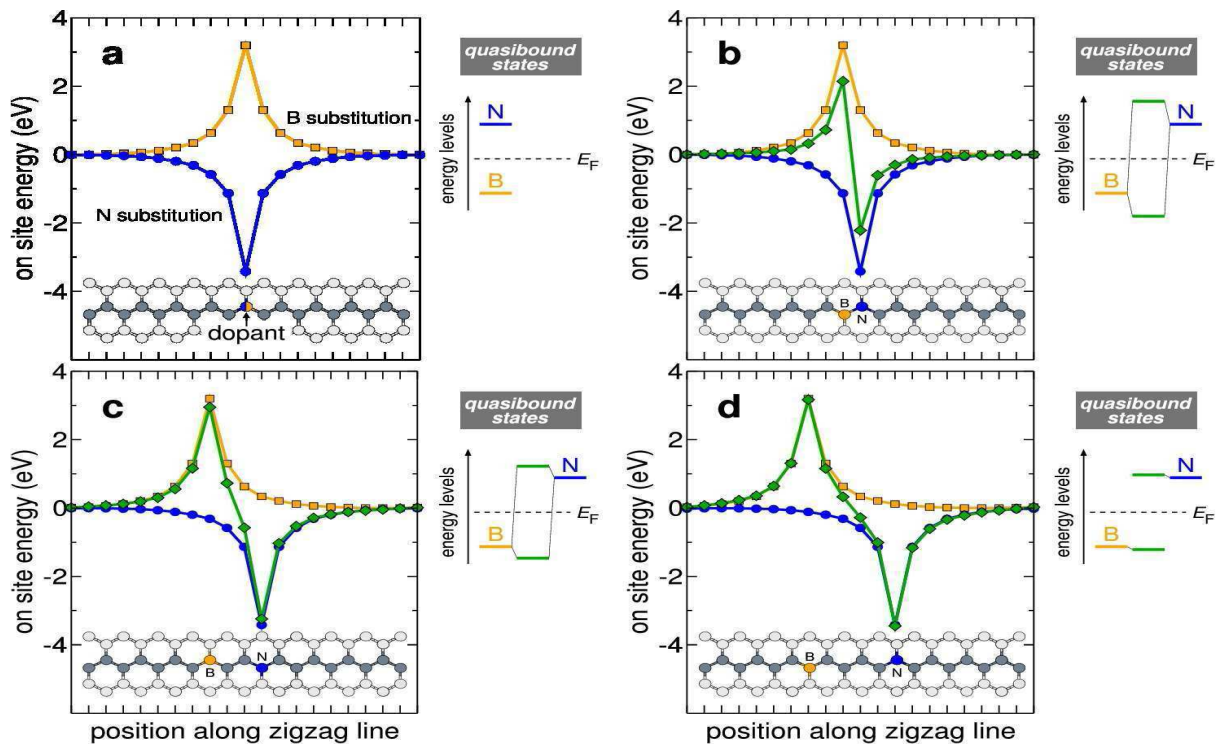


Fig. IV. 14 Allures du potentiel effectif généré par les états défauts B et N dans les structures défauts BN dans une feuille de graphène. a) simple substitution B (ou N), b) le dimère BN, c) le défaut BCCN et d) le défaut BCCCCN. Pour chaque configuration, une représentation des états quasi-liés correspondante est jointe (à droite).

Dans le dimère BN, lorsque les deux atomes sont premiers plus proches voisins, le potentiel effectif ainsi généré est très bien décrit par une superposition directe (une somme directe) des contributions individuelles de chaque atome isolé (Fig. IV.14 (b)). La profondeur du puits et la hauteur de barrière générés par les atomes N et B respectivement, se réduisent pour se compenser mutuellement. Un retour vers un régime de transmission similaire à celui du régime balistique peut ainsi être justifié dans ce système dopé, proche de l'ordre.

Par ailleurs, dans le cas des motifs défauts BCCN, et BCCCCN (Figs. IV. 14 (c) et (d)), la contribution du potentiel effectif d'interaction est moins significative. Sur une distance séparatrice suffisamment importante, les états défauts quasi-liés du Bore et de l'Azote tendent à se découpler reproduisant ainsi des signatures purement individuelles, celles des atomes B et N totalement isolés. Dans le même contexte, la réponse du motif BN diamétralement opposé, reproduit les positions des minimas de conductance en accord avec les énergies des états défauts B et N isolés (Fig. IV. 12(d)). Cependant, l'élargissement apparu sur ces minimas est synonyme de l'augmentation du taux de désordre dans la structure, survenu par la présence simultanée du B et de N sur une même période (dans la direction transversale).

En résumé, nous avons décrit - sur la base d'une approche ab-initio- les propriétés de transmission à travers une paire BN, sous l'influence de l'effet du potentiel effectif électrostatique généré simultanément par les défauts B et N dans le nanotube. Le taux de recouvrement entre états défauts quasi liés B et N définit les énergies propres des états défauts quasi-liés relatifs à toute configuration BN. Ces états défauts résultants sont responsables du phénomène de la rétrodiffusion global à travers la paire BN et la diminution du coefficient de transmission.

b- Le problème de diffusion à un monodomaine BN dans le nanotube de carbone

Avant d'évoquer l'étude des domaines de défauts BN plus complexes, commençons par examiner le cas du motif NBN pour lequel un dopant supplémentaire N se substitue à un autre atome de carbone en position de premier plus proche voisin au dimère BN. Le profil de la transmission obtenu dans cette configuration est quasiment similaire à celui de la simple substitution en N aussi bien pour le (10,10) que le (17,0) (Fig. IV.13 (e) et (j)) : Par le fait

qu'un état propre au motif NBN coïncide avec celui de l'Azote et que les énergies propres des deux autres états obtenus, sont suffisamment éloignées du niveau de Fermi, les structures *N* et *NBN* sont équivalentes (Idem pour le motif défaut BNB qui à son tour reproduit le profile de transmission de la simple substitution en B). Dans ces conditions, le dimère BN acquiert le statut d'élément neutre dans le NBN (et le BNB)

Pour un défaut domaine beaucoup plus complexe (ayant 7N et 7B par exemple), les propriétés de transmission montrent des profils différents en fonction de l'orientation géométrique du nano-défaut dans le nanotube. Entre la configuration Antracene en forme linéaire suivant l'axe du tube (Fig. IV. 15 (a)) et la configuration Phenantrene en forme C suivant la direction chirale (Fig. IV. 15 (b)), les interactions entre états défauts B et autres N sont différentes : L'effet de la répulsion des états quasi-liés des atomes isolés B et N est plutôt favorisé dans la seconde configuration (en forme de C). Par ailleurs, dans le cas de la configuration (7N et 6B), la présence d'un atome N en surplus dans le nano-domaine, donne une réponse de transmission similaire à celles du NBN et de la simple substitution en N (Fig. IV. 15 (b)).

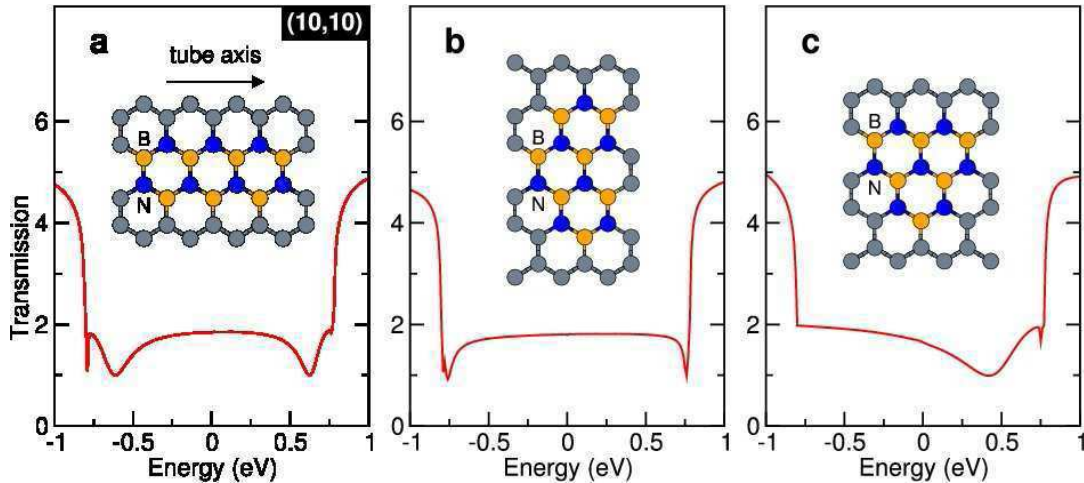


Fig. IV. 15. Conductance quantique de nano-domaine à 7N et 7B (a) aligné (b) perpendiculaire par rapport à l'axe du tube. Exemple de nano-domaine ayant un excès de dopant N (7N, 6B)

Partant de ces effets d'orientation géométrique du monodomaine, nous nous sommes intéressés à la description des propriétés de transmission des défauts amas BN dont l'extension (indiquée en fonction du nombre de dimères BN) se fait suivant la direction transversale (Fig. IV. 16. a).

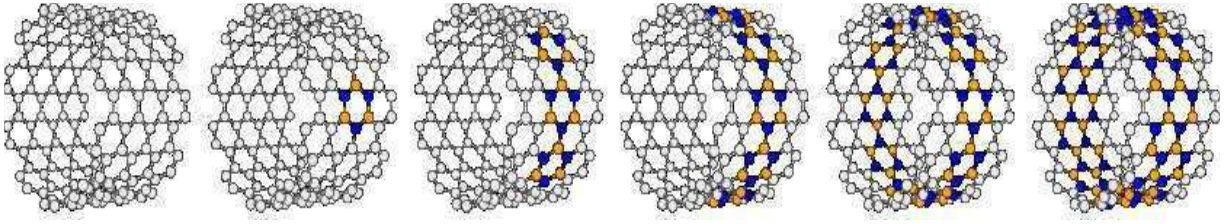


Fig. IV.16 a) Construction de mono-domaines BN mesurés en nombre de dimères BN
De gauche à droite : 0, 3, 9, 15, 30 et 40 dimères BN

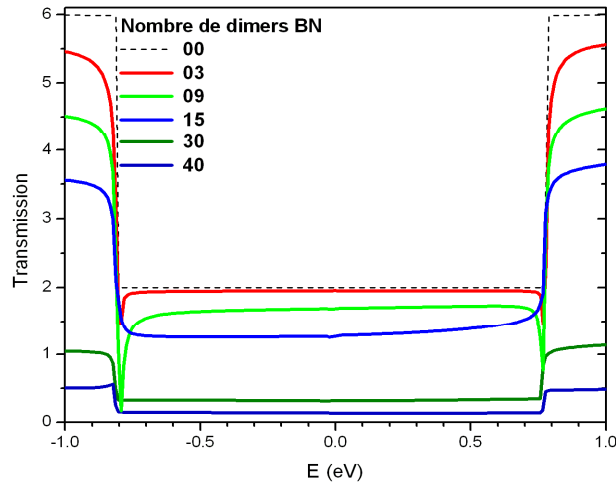


Fig. IV.16 b) Les profils du coefficient de transmission des monodomaines BN contenant (de haut en bas) : 0, 3, 9, 15, 30 et 40 dimères BN

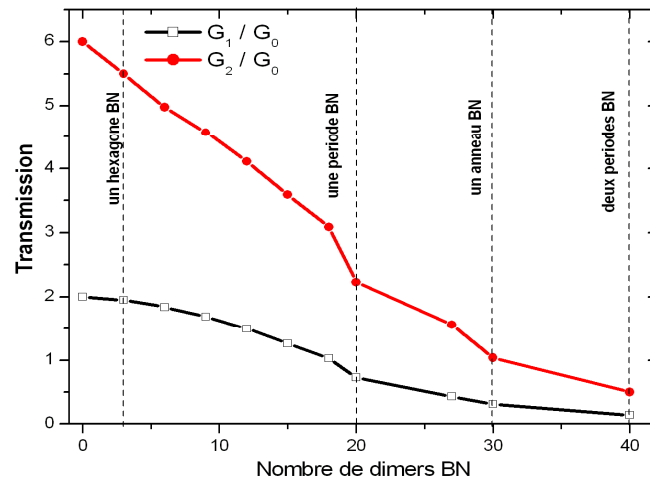


Fig. IV. 16 c) Réponses de la hauteur des paliers de conductances (en G_0) au niveau de Fermi ($E=0$ eV) et au plus loin que la 1^{ère} singularité de Van Hove ($E \approx 1.0$ eV) en fonction de la taille du mono-domaine nanométrique mesurée en nombre de dimères BN.

L'étude du coefficient de transmission de ces structures particulières montre qu'en aucun cas, les signatures individuelles des états défauts isolés du Bore et de l'Azote n'apparaissent sur les différents profils de transmission : la transmission préserve la forme de fonction escalier (similaire à celle d'un dimère BN) alors que des décroissances des hauteurs des deux premiers paliers de conductances (définis respectivement au niveau de Fermi $G_1(E=0)$ et au voisinage de la singularité de Van Hove $G_2(E \approx 1 \text{ eV})$, en fonction du nombre croissant des dimères BN, sont enregistrées. A partir de la moitié d'un anneau BN (correspondant à 5 hexagones BN successifs dans la direction transversale), une décroissance exponentielle de la transmission correspondant à un effet tunnel est obtenue. A un anneau BN complet (correspondant à 10 hexagones BN successifs dans la direction transversale), la conduction devient insignifiante. Dans ce cas, une barrière de potentiel effectif suffisamment importante, infranchissable aux ondes électroniques, est dressée le long de tout le contour du nanotube (voir Fig. IV.16 (d)).

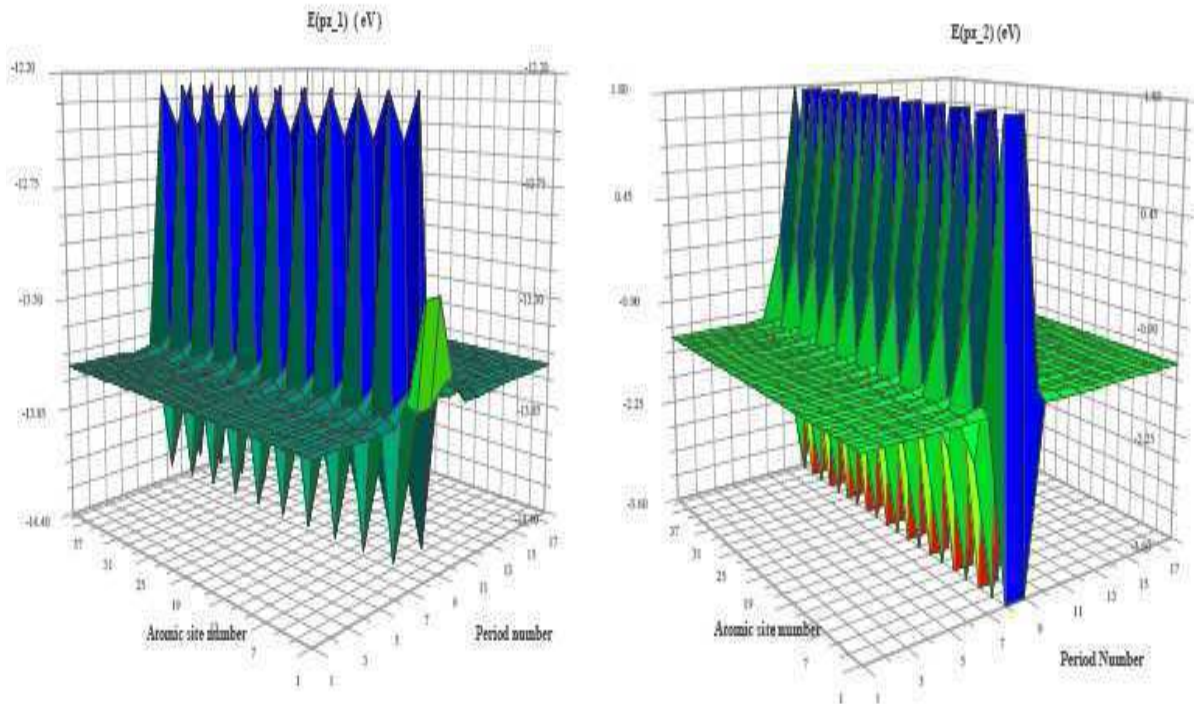


Fig. IV.16 d) Allure du potentiel effectif $E(pz_1)$ et $E(pz_2)$ dans le cas d'un anneau BN complet (nombre de dimère BN = 30).

Pour des motifs défauts BN plus épais (deux périodes complètes BN, équivalent à 40 dimères BN), la transmission du premier palier devient quasiment nulle. Une augmentation de la concentration des dimère BN provoque une extinction totale des canaux de transmission et l'apparition d'une bande interdite.

c- Le phénomène de résonance par effet dimère conventionnel

L'étude précédente sur l'évolution du coefficient de transmission en fonction du nombre BN dans la direction transversale a montré l'installation de l'effet tunnel pour des nano défauts monodomains suffisamment contraignants.

Motivés par le phénomène de délocalisation dans les systèmes unidimensionnels aléatoires, nous avons pensé à établir une corrélation de désordre à courte portée pour le motif défaut monodomains BN conformément à la conception originale du défaut dimère, tel étudié dans les chapitres précédents. Il s'agira d'une structure à double motifs nano-domaines séparés par une ou plusieurs périodes du réseau hôte : La structure double période BN, est constituée de deux périodes BN séparées par une période de carbone (10,10), tandis que dans la structure double anneau, deux anneaux BN (30 dimères BN chacun) sont séparés par une période du réseau hôte. Finalement, dans la double période BN élargie, deux périodes du réseau hôte séparent les deux périodes BN. (Figs. IV.17 a,b et c respectivement).

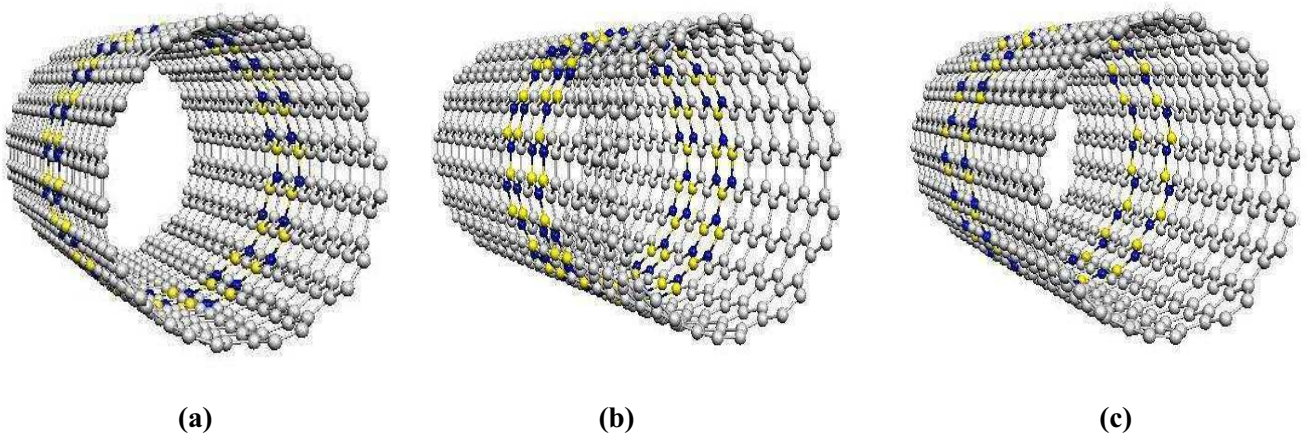


Fig. IV. 17 : Structures en double périodes à motif BN: a) période, b) anneau et c) période élargie.

Les réponses de transmission pour chacune des ces structures sont illustrées sur la Fig. IV. 17 (d). Comparativement à la Fig. IV. 16 (b) reproduisant l'évolution du coefficient de transmission en fonction de la taille du monodomaine, nous constatons un changement drastique dans les profils de transmission : Des maxima de conductance $T = 1 G_0$ et $T = 2 G_0$ apparaissent dans le spectre de transmission de la structure double anneaux BN (courbe en bleu)

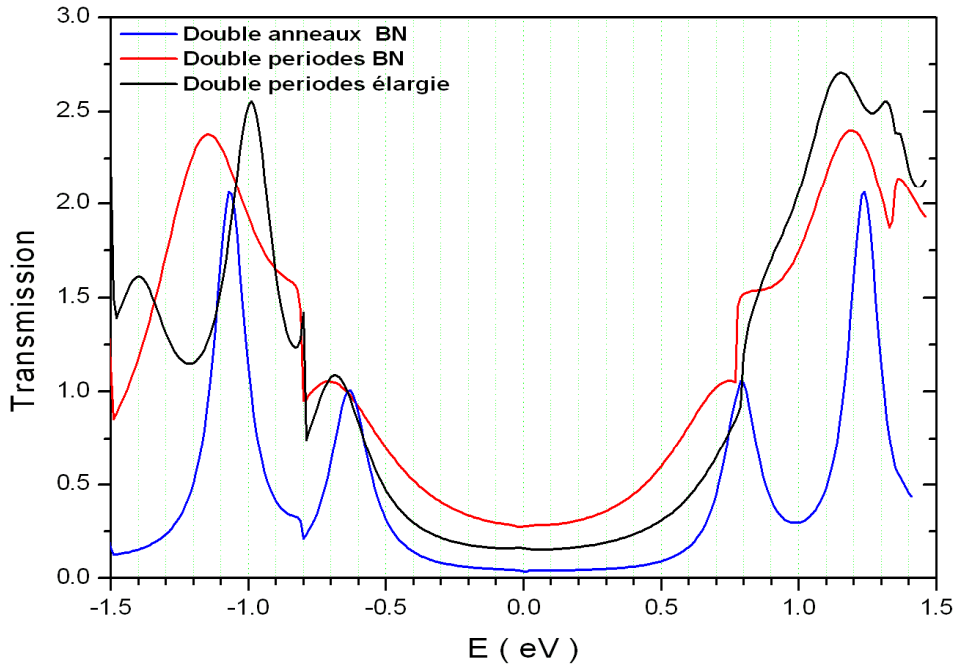


Fig. IV. 16 d. Apparition des résonances dimère dans les réponses de transmission de nanotubes à monodomains BN corrélés.

Une variation dans l'épaisseur de la barrière BN influe sur les propriétés de ces maxima de transmission : En effet, pour la structure double périodes BN (courbe en rouge), les pics de transmission s'élargissent et se positionnent à des énergies plus basses par rapport à la réponse de la structure double anneaux BN.

Par contre, la considération d'une région séparatrice plus large entre les deux périodes BN, ne semble guère reproduire un effet cohérent: Les réponses de telles structures restent assujetties à l'allure du potentiel effectif généré par les nano-domaines. A ce sujet, aucun rapprochement avec le modèle de Kronig-Penney à profile rectangulaire n'a pu être réalisé : Le fait de disposer d'un profil de potentiel effectif non rectangulaire (différent du modèle de Kronig-Penney, tel examiné dans le chapitre précédent), nous amène à réfléchir à modéliser différemment ce type de structures dans l'objectif de mieux caractériser ces pics de transmission. Néanmoins, cette approche de nano-défauts BN équivalente au motif dimère, nous a permis de mettre l'accent sur la possible apparition de l'effet tunnel résonant comme mode de transmission dans des nanotubes de carbone dopé BN . L'ajustement convenable des

propriétés intrinsèques des motifs défauts BN et hôte, permet de contrôler le positionnement de ces résonances et leurs natures. Un défi intéressant est à relever dans ce sens.

Finalement, l'autre aspect intéressant de l'étude de l'effet du co-dopage BN réside dans l'examen des propriétés de transport dans les systèmes mésoscopiques à dopage BN aléatoires. La méthode appropriée consiste à identifier les paramètres ab-initio (ajustables) nécessaires à la description du potentiel effectif dans une supercellule pour pouvoir les reproduire à une échelle beaucoup plus grande dans le modèle des liaisons fortes [31,34] (voir annexe III.2). Ceci fera l'objet d'un autre travail dans l'avenir !

III. Conclusion

Les propriétés de transport dans les nanotubes dopés simultanément en B et N ont été examinées dans les nanotubes armchair (10,10) et zigzag (17,0) à désordres B-N corrélé. Partant de données ab-initio directement tirées de structures tubulaires, la transmission à travers le nanotube dopé a été déterminée par le formalisme de la fonction de Green.

Contrairement à la simple substitution B (N), les signatures individuelles des défauts B et N n'apparaissent pas sur le profil de transmission du dimère BN. En se basant sur la méthode du potentiel effectif généré par chaque dopant, les états défauts B et N se repoussent mutuellement, faisant éloigner les états défauts BN résultants du niveau de Fermi. Aussi avec une compensation presque totale de la barrière et du puits de potentiel générés respectivement par les atomes B et N, la paire BN se comporte comme deux atomes de carbone neutres.

Pour des monodomains BN, selon l'orientation de l'amas dans le nanotube de carbone, le recouvrement entre les états défauts B et N est favorisé ou défavorisé. Des signatures différentes peuvent ainsi en émerger. Avec l'augmentation de la taille de monodomaine BN, l'effet tunnel est obtenu comme mécanisme dominant de la transmission.

Finalement, l'étude de domaines BN séparées a été mise en correspondance avec l'étude des motifs dimère vus dans les chapitres précédents. Devant ce type de désordre, des résonances dimère apparaissent dans le profile de transmission, évoquant ainsi l'effet tunnel résonant.

En perspective, nous pensons à l'étude des propriétés de transport des nanotubes de carbone mésoscopiques co-dopés B et N à désordre non corrélé. La présence aléatoire de motifs dimère BN transparents sur plusieurs cellules successives serait un challenge intéressant à relever dans le but de supprimer les signes de localisations d'Anderson individuelle du B et du N au dépend d'une conduction nettement améliorée.

Dans le même contexte, le modèle du dimère aléatoire serait également un autre candidat potentiellement intéressant pour les défauts monodomains les plus importants.

IV. Bibliographie

1. L.V. Radushkevich and V.M. Lukyanovich, Zurn. Fisic. Chim. **26**, 88 (1952)
2. J.F. Colomer and G. Van Tendeloo, *Electron diffraction and microscopy of single walled carbon nanotube bundles*, *Electron microscopy and nanotubes*, Kluwer Publishers, 45 (2003).
3. S. Ijima, Nature **354**, 56 (1991).
4. S. Ijima , T. Ishihachi , Nature **363**, 603 (1993).
5. J. Hone, *Dekker encyclopedia of nanoscience and nanotechnology*, 603 (2004); J. Che, T.Cagin, and W.A. Goddard, Nanotechnology **11**, 65 (2000).
6. M. Sammalkorpi, A. Krashenninnkov, A. Kuronen, K. Nordlund and K. Kashi, Phys. Rev. B **70**, 245416 (2004).
7. J.P. Salvetat, J.M. Bonard, N.H. Thomson, A.J. Kulik, L. Forro, W. Benoit and L. Zuppiroli, Appl. Phys. A **69**, 255 (1999).
8. Z.K. Tang , L. Zhang , N. Wang , X.X. Zhang, G.H. Wen, G.D. Li, J.N. Wang, C.T. Chan and P. Sheng, Science **292**, 2462 (2001)
9. M.Kociak, A.Yu. Kasumov, G. Guéron, B. Reulet, I. Khodos, Yu. B. Gorbato, L. Vaccarini and H. Bouchiat, Phys. Rev. Lett. **86**, 2416 (2001)
10. F. D'Souza, R.Chitta, A.S.D. Sandanayaka, N.K. Subbaiyan, L.D'Souza, Y. Araki and O. Ito, J. Am. Chem. Soc.**129**, 15865 (2007)
11. Z. Guo, F. Du, D. Ren, Y. Chen, J. Zheng, Z. Liu and J. Tian , J. Mater. Chem. **16**, 3021 (2006).
12. J.C. Charlier, X. Blase and S. Roche, Rev. Mod. Phys.**79**, 677 (2007).
13. J.C. Slater and J.F. Koster, Phys. Rev. **94**, 1498 (1954).
14. P. Lambin, *The tight-binding hamiltonian and its diagonalization*, L.P.S., FUNDP (1983).
15. V. Meunier, *Les nanotubes de carbone: Propriétés électroniques et structurales des jonctions et simulation d'image et de spectres STM*. Thèse de Doctorat, Université de Namur (FUNDP). Belgique (1999).
16. S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge studies in semiconductor physics and microelectronic engineering, Cambridge university press, Cambridge, England (1995).
17. C.T. White and T.N. Todorov, Nature **339**, 240 (1998).

18. T. Kostyrko, M. Bartkowiak and G.D. Mahan, Phys. Rev. B **59**, 3241 (1999); Phys. Rev. B **60**, 10735 (1999)
19. M. Hjort and S. Staftröm, Phys. Rev. B **63**, 113406 (2001)
20. G.D. Mahan, Phys. Rev. B **69**, 125407(2004)
21. S. Latil, S. Roche, D. Mayou and J.C. Charlier, Phys. Rev. Lett. **92**, 256805 (2004)
22. S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomson and P. Ordejon, Phys. Rev. B **66**, 035412 (2002)
23. R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, *Physical properties of carbon nanotubes*, Imperial college press, London (1998).
24. S.M.M. Dubois, *Quantum transport in graphène bases nanostructures*, Thèse de Doctorat, Université Louvain la neuve, Belgique (2010).
25. M. Brandbyge, J.L. Mozos, P. Ordejon, J. Taylor, K. Stokbro, Phys. Rev. B **65**, 165401 (2002).
26. J. M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P.Ordejon and D. Sanchez-Portal, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 2745 (2002).
27. R. Landauer, IBM, J. Res. Dev. **1**, 223 (1957); Phil. Mag. **21**, 863 (1970)
28. M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986), IBM J. Res. Dev. **31**, 63 (1988)
29. M.P. Lopez-Sancho, J.M. Lopez-Sancho and J. Rubio, J. Phys. F.**14**, 1205 (1984), **15**, 851 (1985).
30. M.B. Nardelli, Phys. Rev.B, **60**, 7828 (1999)
31. R. Avriller, *Contribution à la modélisation théorique et à l'étude du transport quantique dans les dispositifs à base de Nanotubes de carbone*, Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier – Grenoble1, Grenoble, France, (2009).
32. R. Avriller , S. Latil, F. Triozon, X. Blase and S. Roche , Phys. Rev. B **74**, 121406 (2006).
33. C. Adessi, S. Roche and X. Blase, Phys. Rev. B **73**, 125414 (2006)
34. R. Avriller, S. Roche , F. Triozon, X. Blase and S. Latil, Modern Phys. Lett. B **21**, 1955 (2007)
35. L. Chico, L.X. Benedict, S.G. Louie and M.L. Cohen, Phys. Rev. B **54**, 2600 (1996)
36. H.J. Choi, J. Ihm, S.G. Louie and M.L. Cohen , Phys. Rev. Lett. **84**, 2917 (2000)
37. G.D. Mahan, Phys. Rev.B **69**, 125407 (2004)
38. N.P. Anantran and T.R. Govindan, Phys. Rev. B **58**, 4882 (1998)
39. P.L. McEun, M. Bockrath, D.H. Cobben, Y-G. Yoonand S.G. Louie, Phys. Rev. Lett. **83**, 5098 (1999).
40. S. Latil, S. Roche and J.C. Charlier, Nanoletters **5**, 2216 (2005)

41. B. Biel, F.J. Garcia-Vidal, A. Rubio and F. Flores, Phys. Rev. Lett. **95**, 266801 (2005).
42. G. P.J. De Pablo, Gomez-Navarro, J. Gomez-Herrero, B. Biel, F.J. Garcia-Vidal, A. Rubio and F. Flores ; Nat. Mat.**4**, 435 (2005); F. Flores, B. Biel, A. Rubio, F.J. Garcia-Vidal, C. Gomez-Navarro, P. de Pablo and J. Gomez-Herrero, J. Phys. Cond. Matter **20**, 304211 (2008)
43. A. Lopez-Benazilla, F. Triozon, S. Latil, X. Blase and S. Roche, Nanoletters **8**, 2613 (2008)
44. A. Jorio, G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus (Eds.): *Carbon Nanotubes, Topics Appl. Physics* **111**, 531(2008) , Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2008)
45. Y. Miyamoto, A. Rubio, M. Cohen , S. Louie , Phys. Rev. B **50**, 4976 (1994)
46. S. Azvedo, R. de Paiva , Europhys. Lett. **75**, 126 (2006)
47. M. Matos, S. Azvedo, J.R. Kashny, Solid. State Commun. **149**, 222 (2009)
48. X. Blase, J.C. Charlier, A. De Vita, R. Car; Appl. Phys. A: Mat. Sci. Process. **68**, 293 (1999); Appl. Phys. Lett.**70**, 197 (1997).
49. M. Terrones, J. M. Romo-Herrera, E. Cruz-Silva, F. López-Urías, E. Muñoz-Sandoval, J. J.Velázquez-Salazar, H. Terrones, Y. Bando, and D. Golberg; Materials today **10**, 30 (2007)
50. V. Ivanovskaya, A. Zobelli, O. Stephane, P. Briddon and C. Colliex , J. Phys. Chem. C **113**, 16603 (2009).
51. H. Khalfoun, P. Hermet, L. Henrard et S. Latil, papier soumis à Phys. Rev. Lett.

Conclusion générale

Notre étude a eu pour vocation globale de décrire les effets de la corrélation du désordre à courte portée sur la propagation d'ondes (électroniques, mécanique puis électromagnétiques) dans les systèmes unidimensionnels. Nous nous sommes intéressés aux propriétés de transmission résultant de l'effet dimère dans le cadre d'un désordre binaire compositionnel.

La description des réponses de transmission d'un système électronique dont la distribution binaire obéit à la fonction delta de Dirac, a permis de présenter l'effet dimère dans son aspect conventionnel : Obéissant à la condition de transparence du motif défaut dimère, la résonance dimère se situe sur un canal de transmission de la bande permise de la structure hôte, sous forme d'un pic de transmission unité. Accompagnée d'une augmentation considérable de la conductance (diminution significative de la résistance) du système, cette résonance traduit la transition de phase métal-isolant pouvant apparaître depuis un état étendu ($\langle \frac{L}{\xi} \rangle \ll 1$) vers un état localisé ($\langle \frac{L}{\xi} \rangle > 1$) (ou vice-versa). L'état résonant présente une fonction enveloppe périodique à amplitude uniforme similaire (mais pas identique) à celle d'une onde de Bloch dans un ordre parfait. Le régime de transmission à la résonance dimère conventionnelle est diffusif.

Par analogie au système électronique précédent, la propagation d'ondes mécaniques dans des structures unidimensionnelles désordonnées a été également examinée. Présentant un potentiel obéissant à la fonction delta de Dirac dont l'intensité est quadratique (différente de la valeur uniforme du modèle électronique équivalent de Kronig Penney), le système de la corde vibrante chargée en masses reproduit aussi l'effet dimère conventionnel. Cependant, l'insertion de ressorts sur chaque cellule modifie l'allure du potentiel effectif et fournit à la structure des propriétés de transmission plus intéressantes :

- Une résonance de commutation conventionnelle pour laquelle une situation identique à l'ordre parfait (déterministe) est obtenue. En absence de toute distinction entre les motifs défaut et hôte, des modes de propagation de Bloch accompagnent cette résonance.

- Le choix approprié des paramètres structuraux permet de procéder à l'alignement convenable des résonances caractéristiques (libre et dimère) des motifs défaut et hôte : La résonance de commutation balistique est obtenue par l'alignement des fréquences libres des deux motifs sur une fréquence commune, tandis que la résonance dimère balistique est obtenue par l'alignement de la résonance dimère du motif défaut sur la fréquence libre du motif hôte.
- Disposant d'un régime de transmission balistique dans le modèle du dimère aléatoire, les filtres mécaniques conventionnels à désordre binaire corrélé ont été revisités : Tout en préservant le caractère universel de la transition de phase (mode localisé – mode étendu) correspondante, des améliorations dans la qualité de transmission à la résonance dimère balistique ont été obtenues par rapport au cas conventionnel.
- La résonance dimère balistique peut être conservée dans l'alliage hôte désordonné pour autant que la contrainte de la commutation balistique soit préservée le long de toute la structure désordonnée. Le désordre de masse devient un paramètre ajustable pour améliorer la qualité de la transmission de ces structures.

D'autre part, par analogie avec le modèle électronique de Kronig-Penney, la propagation des ondes électromagnétiques dans les systèmes unidimensionnels stratifiés de couches diélectriques homogènes a été également étudiée dans le cadre du modèle du dimère aléatoire.

L'étude de l'effet dimère photonique a permis de montrer :

- L'apparition de l'effet dimère conventionnel et la suppression de la localisation unidimensionnelle de la lumière dans les cristaux photoniques désordonnés à fort contraste de désordre compositionnel.
- La détermination de l'équation de résonance générale de l'effet dimère dans le cadre du modèle de Kronig-Penney à profil rectangulaire (similaire à celle du modèle classique de la corde vibrante chargée en masse-ressort)

- La cellule élémentaire optique est caractérisée par deux résonances : la résonance stationnaire (équivalente à la résonance libre dans le système masse-ressort) et la résonance de transparence du motif dimère correspondant. L'application de la procédure d'alignement des différentes résonances hôtes et défaut a permis de décrire plusieurs types de commutations : De la simple commutation entre modes stationnaires hôte et défaut (équivalente à la commutation balistique dans le système mécanique précédent), en passant par la commutation mixte des résonances (équivalente à la résonance dimère balistique dans le système mécanique précédent) nous avons abouti à la commutation de transparence optimisée des résonances dimère, pour laquelle une nouvelle conditions de transmission , plus favorable est obtenue dans ce milieu particulièrement désordonné. Le régime balistique s'installe par excellence et s'affirme de plus en plus à la résonance dimère en remplacement du mode diffusif conventionnel.
- Une mini-bande à transmission balistique de largeur appréciable est obtenue autour de la commutation de la transparence optimisée des résonances dimère. Ceci est approprié pour la conception de filtres balistiques pour la transmission des ondes électromagnétiques. Aussi avec la possibilité de la manipulation des paramètres hôte et défaut, ce dispositif optique particulièrement désordonné préserve son aspect balistique tout en présentant une variété de réponses totalement ajustables au voisinage de la résonance dimère balistique.

La dernière partie de ce présent travail a consisté sur la description de la propagation des ondes électroniques dans les nanotubes de carbone en présence de dopage(s) chimique(s). La substitution d'un atome de carbone par un atome dopant Bore (B) (ou Azote (N)) détruit la symétrie de translation du système et fournit à la structure de bandes du réseau hôte des états défauts responsables du phénomène de la rétrodiffusion et la diminution de la transmission aux énergies correspondantes.

Par ailleurs, la présence simultanée du Bore et de l'Azote en co-dopage dans le nanotube hôte présente des propriétés intéressantes: La distance séparatrice B-N contrôle le taux de recouvrement entre les états défauts induits par B et N et décide du positionnement des états défauts résultants, propres au dopant B-N au sein du spectre de transmission. Dans le

cas d'un dimère BN (B et N en positions de premiers plus proches voisins), le nanotube dopé par ce défaut devient similaire - au voisinage du niveau de Fermi - à un nanotube parfait.

Motivés par ce phénomène de délocalisation par la corrélation du désordre BN à courte portée, nous avons examiné les propriétés de transport de monodomaines BN. Les réponses de transmission dépendent non seulement de l'orientation collective du nano défaut au sein de la structure hôte mais aussi du nombre d'atomes B et N qui s'y trouvent, faisant du monodomaine BN un pseudo-dopant donneur (accepteur) dans le cas de surplus d'un atome de N (B) dans la structure. En cas de parité égale, et en absence de signatures individuelles des dopants N (B), le monodomaine transversal reproduit une fonction escalier similaire à celle du nanotube propre avec une diminution quasi linéaire de la hauteur des paliers en fonction de la concentration des dimères BN. Une extinction quasi-totale de la transmission est obtenue pour ces nano défauts BN totalement infranchissables par effet tunnel.

Pour remédier à ce genre d'obstacle, le nano défaut BN est dupliqué en une paire de monodomaines séparée conformément à la conception du motif dimère. Des pics de transmission à intensités appréciables (similaires à ceux de l'effet dimère aléatoire mécanique et optique) sont ainsi restaurés dans le spectre de transmission. Ceci est synonyme de l'installation de l'effet tunnel résonant comme processus de transport.

Dans sa globalité, notre travail présente un intérêt fondamental pouvant aboutir à des perspectives intéressantes dans le domaine expérimental :

- La généralisation de la notion de la résonance balistique aux désordres corrélés d'ordres supérieurs (trimère, quadrimère et n-mère) aussi bien pour les chaînes linéaires que pour les structures unidimensionnelles à profil de potentiel rectangulaire.
- L'étude de l'effet dimère dans les films photoniques réalistes $\text{SiO}_2/\text{TiO}_2$. Examiner l'effet de l'incidence oblique sur les différents modes de transmission TE et TM.
- La corrélation du désordre B-N (dimères BN et nanodomaines BN) dans les nanotubes de carbone à tailles mésoscopiques.

ANNEXES

Annexes

Annexe I

Modèle électronique de Kronig-Penney pour une distribution de Dirac	215
Formule de Poincaré	217

Annexe II

Matrice de transfert pour les systèmes stratifiés unidimensionnels	219
1- Equations de Maxwell pour un milieu homogène.....	219
2- Comment une onde se propage-t-elle entre deux couches homogènes successives ?	223
3- Propriétés des systèmes périodiques : les cristaux photoniques	227
a- Ondes de Bloch.....	227
b- Matrice de translation.....	230
c- Modèle optique de Kronig-Penney.....	233
4- Les films photoniques.....	236
a- Matrice de transfert	237
b-Coefficients de transmission et coefficient de Lyapunov réduit	239

Annexe III

La transmission électronique à travers des nanotubes infinis	242
La méthode du potentiel effectif	244

Annexe I

1. Modèle électronique de Kronig-Penney pour une distribution de Dirac

Soit un système 1d caractérisé par le potentiel

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_n) \lambda_n(x) y(x) \quad (\text{A.I.1})$$

Sur chaque région (n), la solution de l'équation de Schrödinger correspondante est donnée par :

$$\psi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x} \quad x_n < x < x_{n+1} \quad (\text{A.I.2})$$

où A_n, B_n sont les amplitudes relatives aux ondes progressives régressives. k_n étant le vecteur d'onde correspondant. Sur une période (voir Fig. 1), l'utilisation des conditions de continuité de $y(x)$ et de sa dérivée $\frac{\partial y(x)}{\partial x}$ en $x = 0$ donne

$$\begin{cases} \psi_2(0) = \psi_1(0) \\ \frac{\partial \psi_2(0)}{\partial x} - \frac{\partial \psi_1(0)}{\partial x} = \lambda \psi_1(0) \end{cases} \quad (\text{A.I.3})$$

$$\begin{cases} A_2 + B_2 = A_1 + B_1 \\ ikA_2 - ikB_2 - ikA_1 + ikB_1 = \lambda A_1 + \lambda B_1 \end{cases} \quad (\text{A.I.4})$$

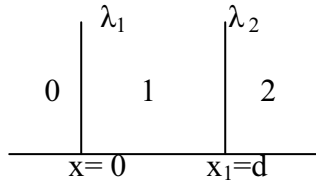


Fig. 1. Représentation schématique d'une période

Par ailleurs, l'application du théorème de Bloch sur une période entre les positions $x_0 = 0$ et $x_1 = d$, permet d'écrire :

$$\psi_1(d) = \psi_1(0) e^{iqd} \quad (\text{A.I.5})$$

où q est le vecteur d'onde relatif à la période d de la structure. L'application des conditions de continuité en $x_1 = d$ donne :

$$\begin{cases} \psi_2(d) = \psi_1(0) e^{iqd} \\ \frac{\partial \psi_2(d)}{\partial x} = \frac{\partial \psi_1(0)}{\partial x} e^{iqd} \end{cases} \quad (\text{A.I.6})$$

$$\begin{cases} A_2 e^{ikd} + B_2 e^{-ikd} = A_1 e^{iqd} + B_1 e^{iqd} \\ ikA_2 e^{ikd} - ikB_2 e^{-ikd} = ikA_1 e^{iqd} - ikB_1 e^{iqd} \end{cases} \quad (\text{A.I.7})$$

$$\begin{cases} A_1 e^{iqd} + B_1 e^{iqd} - A_2 e^{ikd} - B_2 e^{-ikd} = 0 \\ A_1 e^{iqd} - B_1 e^{iqd} - A_2 e^{ikd} + B_2 e^{-ikd} = 0 \end{cases} \quad (\text{A.I.8})$$

L'ensemble des ces équation :

$$\begin{cases} A_1 + B_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (\frac{\lambda}{ik} + 1) A_1 + (\frac{\lambda}{ik} - 1) B_1 - A_2 + B_2 = 0 \\ A_1 e^{iqd} + B_1 e^{iqd} - A_2 e^{ikd} - B_2 e^{-ikd} = 0 \\ A_1 e^{iqd} - B_1 e^{iqd} - A_2 e^{ikd} + B_2 e^{-ikd} = 0 \end{cases} \quad (\text{A.I.9})$$

forme un système d'équation linéaire homogène :

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ \frac{\lambda}{ik} + 1 & \frac{\lambda}{ik} - 1 & -1 & 1 \\ e^{iqd} & e^{iqd} & -e^{ikd} & -e^{-ikd} \\ e^{iqd} & -e^{iqd} & -e^{ikd} & e^{-ikd} \end{vmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = 0 \Leftrightarrow M \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{A.I.10})$$

qui admet des solutions A_1, B_1, A_2 et B_2 non nulles si et seulement si

$$\det M = 0 \quad (\text{A.I.11})$$

Le développement de cette expression à partir du calcul des déterminants réduits permet de simplifier la procédure pour aboutir à l'expression

$$\det M = 2 \cos kd + \frac{\lambda}{k} \sin kd - 2 \cos qd \quad (\text{A.I.12})$$

pouvant identifier l'équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney :

$$\kappa(k) = \cos qd = \cos kd + \frac{\lambda}{2k} \sin kd \quad (\text{A.I. 13})$$

dans le cas d'une distribution en fonctions delta de Dirac.

Cette relation permet aussi de déterminer la relation de dispersion $q = q(\lambda)$ correspondante.

2. Formule de Poincaré

Nous nous proposons de résoudre l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \sum_n \lambda_n \delta(x - nd) \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (\text{A.I. 14})$$

correspondante au potentiel $V(x)$ décrit par la distribution de Dirac (Eq. (A.I.1)). Connaissant l'expression de la fonction d'onde et de sa dérivée par rapport à la position x dans chaque région d'indice n ,

$$\begin{cases} \psi_n(x) = A_n e^{ik_n x} + B_n e^{-ik_n x} \\ \psi'_n(x) = ik_n A_n e^{ik_n x} - ik_n B_n e^{-ik_n x} \end{cases} \quad (\text{A.I. 15})$$

L'application des conditions de continuité aux points $x = x_{n-1}$ et $x = x_n$ donne le système d'équation suivant :

$$\begin{cases} \begin{pmatrix} \psi_n(x_{n-1}) \\ \psi'_n(x_{n-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_n x_{n-1}} & e^{-ik_n x_{n-1}} \\ ik_n e^{ik_n x_{n-1}} & -ik_n e^{-ik_n x_{n-1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} \psi_n(x_n) \\ \psi'_n(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_n x_n} & e^{-ik_n x_n} \\ ik_n e^{ik_n x_n} & -ik_n e^{-ik_n x_n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \end{cases} \quad (\text{A.I. 16})$$

L'élimination des amplitudes A_n et B_n permet d'écrire:

$$\begin{pmatrix} \psi_n(x_n) \\ \psi'_n(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos k_n(x_n - x_{n-1}) & \frac{1}{k_n} \sin k_n(x_n - x_{n-1}) \\ -k_n \sin k_n(x_n - x_{n-1}) & \cos k_n(x_n - x_{n-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n(x_{n-1}) \\ \psi'_n(x_{n-1}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.I. 17})$$

Par ailleurs, sachant que l'équation de Schrödinger (A.I. 14) donne aussi

$$\begin{pmatrix} \psi_n(x_{n-1}) \\ \psi'_n(x_{n-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \lambda_{n-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n-1}(x_{n-1}) \\ \psi'_{n-1}(x_{n-1}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.I. 18})$$

L'évolution de la fonction d'onde et de sa dérivée sur une période complète est décrite par :

$$\begin{pmatrix} \psi_n(x_n) \\ \psi'_n(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_n & \beta_n \\ \delta_n & \gamma_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n-1}(x_{n-1}) \\ \psi'_{n-1}(x_{n-1}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.I. 19})$$

où

$$\begin{pmatrix} \alpha_n & \beta_n \\ \delta_n & \gamma_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos k_n(x_n - x_{n-1}) - \frac{\lambda_{n-1}}{k_n} \sin k_n(x_n - x_{n-1}) & \frac{1}{k_n} \sin k_n(x_n - x_{n-1}) \\ -k_n \sin k_n(x_n - x_{n-1}) + \lambda_{n-1} \cos k_n(x_n - x_{n-1}) & \cos k_n(x_n - x_{n-1}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.I. 20})$$

En posant $\psi_i(x_i) = \psi_i$, la suppression de la dérivée de ce système d'équation, permet de définir la formule de Poincaré conformément au calcul de Bellisard et al [III. 38]:

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} &= (\alpha_{n+1} + \frac{\beta_{n+1}}{\beta_n} \gamma_n) \psi_n - \frac{\beta_{n+1}}{\beta_n} \psi_{n-1} \\ \begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \alpha_{n+1} + \frac{\beta_{n+1}}{\beta_n} \gamma_n & -\frac{\beta_{n+1}}{\beta_n} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.I. 21})$$

pour laquelle, l'évolution de la fonction d'onde $\psi(x)$ globale de la structure est donnée de manière récursive sur trois site successifs $n-1, n$ et $n+1$.

Dans le cas de désordre compositionnel ($x_n - x_{n-1} = d$), la formule de Poincaré s'exprime par :

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\kappa_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.I. 22})$$

où $\kappa_n = \cos k_n d + \frac{\lambda_n}{2k_n} \sin k_n d$ est l'équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney correspondent au motif (n) ((A.I. 13).

Annexe II

Matrice de transfert pour les systèmes stratifiés unidimensionnels

Cette section traduit le formalisme universel de la matrice de transfert. Ce formalisme est adéquat pour la description des propriétés de transmission des structures multicouches [III.37-39]. Dans notre étude, nous nous limiterons aux cas des matériaux non dispersifs pour lesquels la permittivité ne varie pas dans la plage des fréquences étudiées. Chaque couche est considérée homogène à interface abrupte. Le contraste entre constantes diélectriques décidera de la hauteur relative à la marche de la barrière optique d'un élément à un autre sur toute la structure.

1 Equations de Maxwell pour un milieu homogène

Dans un milieu homogène (de constants diélectriques ε et permittivité magnétique μ constantes) et en absence de charges et de courants, le champ électromagnétique \vec{E} , \vec{H} obéit aux équations de Maxwell [III.4,8] :

$$\text{div } \vec{E}(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{A.II.1})$$

$$\text{div } \vec{H}(\vec{r}, t) = 0, \quad (\text{A.II.2})$$

$$\vec{\text{Rot}} \vec{E}(\vec{r}, t) + \mu_0 \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.II.3})$$

$$\vec{\text{Rot}} \vec{H}(\vec{r}, t) - \varepsilon \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.II.4})$$

Dans le cristal photonique unidimensionnel, la symétrie essentielle est celle de la translation parallèle aux interfaces. Cette invariance conduit à définir le vecteur d'onde parallèle, (noté $\vec{k}_{//}$) qui sera conservé lors du passage de l'onde électromagnétique d'une couche à une autre. Ce vecteur d'onde a une importance considérable du fait que pour toute onde monochromatique incidente, la composante parallèle de son vecteur d'onde se retrouve conservée sur toutes les ondes transmises et réfléchies dans toutes les directions diffusées. Cette conservation est à l'origine des lois de l'optique géométrique. On ne peut observer les modes propagatifs dans ces systèmes multicouches sans la présence des figures d'interférences correspondantes.

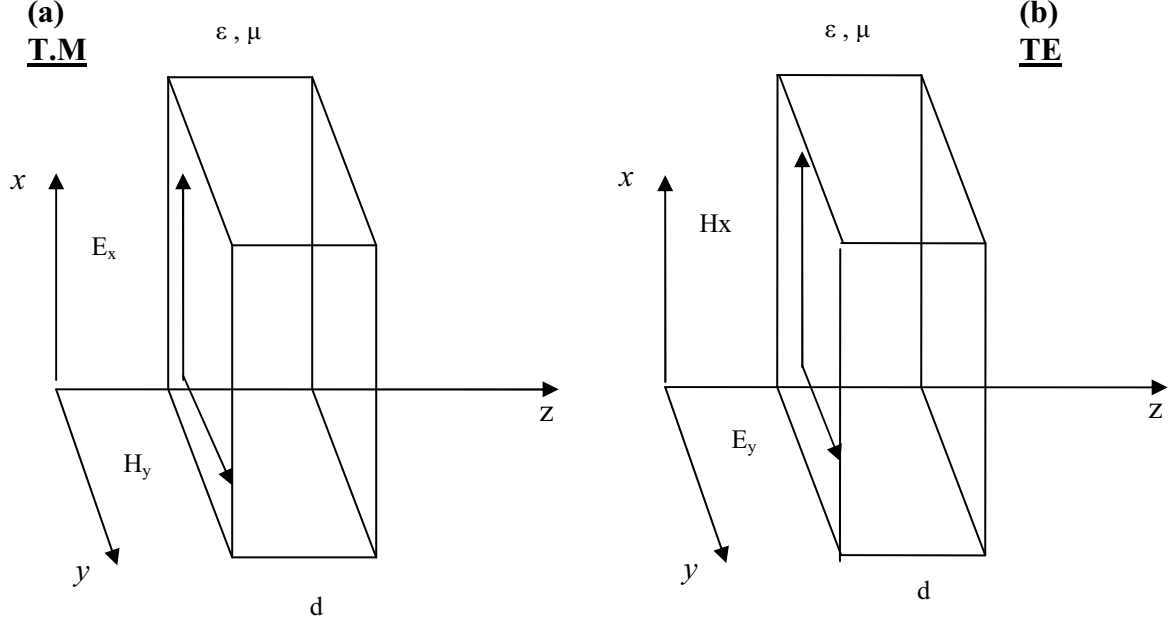


Fig. B 4 La polarisation TM et TE pour une onde électromagnétique

Les champs considérés sont des ondes monochromatiques sinusoïdales se propageant dans la direction y avec une amplitude vectorielle parallèle à l'axe oz

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}(z) \exp i(k_y y - \omega t) \\ \vec{H}(\vec{r}, t) &= \vec{H}(z) \exp i(k_y y - \omega t)\end{aligned}\tag{A.II.5}$$

où ω est la pulsation angulaire.

En injectant les expressions des champs \vec{E} et \vec{H} dans chaque équation de Maxwell, un système de huit équations différentielles, scindées en deux groupes indépendants est obtenu :

$$ik_y E_y(z) + \frac{dE_z(z)}{dz} = 0\tag{A.II.6}$$

$$ik_y H_y(z) + \frac{dH_z(z)}{dz} = 0\tag{A.II.7}$$

$$ik_y E_z(z) - \frac{dE_y(z)}{dz} = i\omega\mu_0 H_x(z)\tag{A.II.8}$$

$$\frac{dE_x(z)}{dz} = i\omega\mu_0 H_y(z)\tag{A.II.9}$$

$$-ik_y E_x(z) = i\omega\mu_0 H_z(z) \quad (\text{A.II.10})$$

$$ik_y H_z(z) - \frac{dH_y(z)}{dz} = -i\omega\epsilon\epsilon_0 E_x(z) \quad (\text{A.II.11})$$

$$\frac{dH_x(z)}{dz} = -i\omega\epsilon\epsilon_0 E_y(z) \quad (\text{A.II.12})$$

$$-ik_y H_x(z) = -i\omega\epsilon\epsilon_0 E_z(z) \quad (\text{A.II.13})$$

Un premier groupe d'équations (Eqs A.II.7, 9, 10 et 11) relie les composantes E_x , H_y et H_z , alors que le second groupe d'équations (Eqs. A.II. 6, 8, 12 et 13) concerne les composantes $H_x(z)$, $E_y(z)$ et $E_z(z)$. Ceci permet de découpler deux types de polarisation :

- **La polarisation transverse magnétique (TM) (ou onde p)**

Le champ magnétique est réduit à une seule composante, orientée suivant la direction Ox , parallèle aux plans d'interface et perpendiculaire à la direction de propagation Oz .

Dans ce cas,

$$E_x(z) = H_y(z) = H_z(z) = 0 \quad (\text{A.II.14})$$

La solution est donnée à partir de l'ensemble des équations

$$E_y = \frac{i}{\omega\epsilon\epsilon_0} \frac{dH_x}{dz} \quad (\text{A.II.15})$$

$$E_z = \frac{k_y}{\omega\epsilon\epsilon_0} H_x \quad (\text{A.II.16})$$

tel que

$$\frac{d^2 H_x}{dz^2} + \left[\left(\frac{\omega}{c} \right)^2 \epsilon_j - k_y^2 \right] H_x = 0 \quad (\text{A.II.17})$$

L'équation d'onde qui définit la composante H_x n'est valable qu'à l'intérieur de la couche homogène. En appliquant convenablement les conditions de raccord entre deux

couches homogènes voisines à travers la continuité des fonctions H_x et $\frac{1}{\epsilon} \frac{dH_x}{dz}$ à l'interface, la résolution de l'équation différentielle du mouvement (Eq. A.II.23) est donnée par

$$H_x(z) = A_j e^{ik_{jz} z} + B_j e^{-ik_{jz} z} \text{ pour } z_j < z < z_{j+1} \quad (\text{A.II.18})$$

où

$$k_{jz} = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon_j - k_y^2} \quad (\text{A.II.19})$$

est le vecteur d'onde longitudinal (parallèle). Les coefficients A_j et B_j représentent les contributions de l'onde progressive et régressive respectivement.

- **La polarisation transverse électrique (TE) (ou onde s) :** Le champ électrique est réduit à une seule composante suivant Ox . On cherchera les composantes E_x , H_y et H_z . En annulant les autres composantes :

$$H_x(z) = E_y(z) = E_z(z) = 0. \quad (\text{A.II.20})$$

le mode TE est déterminé à partir du systèmes d'équation reliant $E_x(z)$, $H_y(z)$, et $H_z(z)$:

$$H_y = \frac{1}{i\omega\mu_0} \frac{dE_x}{dz} \quad (\text{A.II.21})$$

$$H_x = -\frac{k_y}{\omega\mu_0} E_x \quad (\text{A.II.22})$$

$$\frac{d^2 E_x}{dz^2} + \left[\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \epsilon - k_y^2 \right] E_x = 0 \quad (\text{A.II.23})$$

De même pour la polarisation TE, l'application convenable des conditions de continuité sur les fonctions: E_x et $\frac{dE_x}{dz}$ à l'interface entre deux régions homogènes permet de résoudre l'équation du mouvement de l'onde TE (Eq. A.II.23). Dans le cas où le profil des constantes diélectriques est rectangulaire, la solution de cette équation correspond aussi à la superposition des ondes planes progressive et régressive respectivement. En introduisant les coefficients A_j et B_j correspondants, le champ électrique obéit à :

$$E_x(z) = A_j e^{ik_{jz}z} + B_j e^{-ik_{jz}z} \text{ pour } z_j < z < z_{j+1} \quad (\text{A.II.24})$$

où

$$k_{jz} = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon_j - k_y^2} \quad (\text{A.II.25})$$

représente la composante longitudinale du vecteur d'onde dans la couche d'indice j . Les composantes $H_x(z)$ et $H_y(z)$ sont obtenues à partir des relations (A.II.21) et (A.II.22).

2 Comment une onde se propage-t-elle entre deux couches homogènes successives ?

Le système multi-couches est un empilement de couches homogènes suivant la direction de croissance (Oz). Une onde qui se propage dans ce système devra traverser successivement toutes les couches. Par conséquent la résolution globale de l'équation de la propagation de l'onde sur l'ensemble du cristal photonique nécessite la connaissance de la solution locale sur chaque couche puis l'application des conditions de continuité au niveau de chaque interface.

2.1 Conditions de continuité pour la polarisation TE

Soient deux couches voisines d'indice j et $j+1$, de constantes diélectriques ε_j et ε_{j+1} et d'épaisseurs d_j et d_{j+1} respectivement. La composante transverse du champ électrique $E_x(z)$ dans une couche homogène est déterminée à partir des conditions de continuités de $E_x(z)$ et de $\frac{\partial E_x(z)}{\partial z}$ à l'interface $z = z_j$ (voir Fig. B.5).

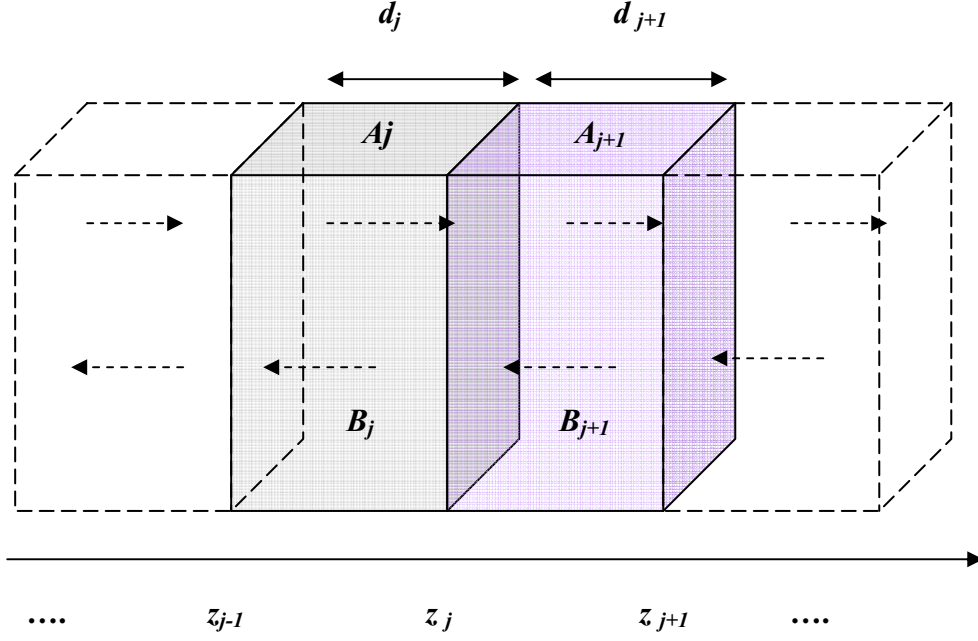


Fig. B.5 Interface entre deux couches successives à constantes diélectriques différentes

Soient

$$E_{xj}(z) = A_j \exp(ik_j z) + B_j \exp(-ik_j z) \text{ pour } z_{j-1} < z < z_j \quad (\text{A.II.26})$$

et

$$\frac{dE_{xj}(z)}{dz} = ik_j A_j \exp(ik_j z) - ik_j B_j \exp(-ik_j z) \text{ pour } z_{j-1} < z < z_j \quad (\text{A.II.27})$$

la solution de l'équation du mouvement et sa dérivée régissant par rapport à la position telle définie dans la région d'indice j .

Pour ces deux fonctions considérées, posons conformément au travail de Sanchez et al [I.21]

$$\Gamma_j^{TE}(z) = \begin{pmatrix} E_{jx}(z) \\ \frac{dE_{jx}(z)}{dz} \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.28})$$

et définissons la matrice Wronksien $W_j(z)$ conformément à :

$$\Gamma_j^{TE}(z) = W_j(z) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.29})$$

A partir du choix des ondes planes progressive et régressive, composantes de la fonction d'onde (Eq. B.26), $W_j(z)$ s'écrit:

$$W_j(z) = \begin{pmatrix} \exp(ik_j z) & \exp(-ik_j z) \\ ik_j \exp(ik_j z) & -ik_j \exp(-ik_j z) \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.30})$$

A chaque interface z_j , l'application des conditions de continuité s'exprime par

$$\Gamma_j^{TE}(z_j) = \Gamma_{j+1}^{TE}(z_j) \quad (\text{A.II.31})$$

Sachant que

$$\Gamma_j^{TE}(z_j) = W_j(z_j) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \Gamma_j^{TE}(z_{j+1}) = W_j(z_{j+1}) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.32})$$

les conditions de raccord entre deux couches successives sont données par

$$\Gamma_{j+1}^{TE}(z_{j+1}) = S_{j+1}^{TE}(z_{j+1}, z_j) \Gamma_j^{TE}(z_j) \quad (\text{A.II.33})$$

où la matrice de transfert

$$S_{j+1}^{TE} = W_{j+1}(z_{j+1}) W_{j+1}^{-1}(z_j) \quad (\text{A.II.34})$$

A partir de l'expression de la matrice Wronskien (Eq. B.30), la matrice de diffusion s'écrit :

$$S_{j+1}^{TE}(z_{j+1}, z_j) = \begin{pmatrix} \exp(ik_{j+1}z_{j+1}) & \exp(-ik_{j+1}z_{j+1}) \\ ik_{j+1} \exp(ik_{j+1}z_{j+1}) & -ik_{j+1} \exp(-ik_{j+1}z_{j+1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \exp(ik_{j+1}z_j) & \exp(-ik_{j+1}z_j) \\ ik_{j+1} \exp(ik_{j+1}z_j) & -ik_{j+1} \exp(-ik_{j+1}z_j) \end{pmatrix}^{-1} \quad (\text{A.II.35})$$

Le développement de la matrice inverse permet d'obtenir :

$$S_{j+1}^{TE}(z_{j+1}, z_j) = \frac{1}{-2ik_{j+1}} \begin{pmatrix} \exp(ik_{j+1}z_{j+1}) & \exp(-ik_{j+1}z_{j+1}) \\ ik_{j+1} \exp(ik_{j+1}z_{j+1}) & -ik_{j+1} \exp(-ik_{j+1}z_{j+1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -ik_{j+1} \exp(-ik_{j+1}z_j) & -\exp(-ik_{j+1}z_j) \\ -ik_{j+1} \exp(ik_{j+1}z_j) & \exp(ik_{j+1}z_j) \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.36})$$

En posant le terme de phase $\delta_j = k_j d_j$ pour lequel k_j et $d_j = z_{j+1} - z_j$ représentent le vecteur d'onde dans la couche d'indice j et son épaisseur physique respectivement, la matrice de diffusion correspondante dans la polarisation TE se résume à :

$$S_{j+1}^{TE}(z_{j+1}, z_j) = \begin{pmatrix} \cos(\delta_{j+1}) & -\frac{1}{k_{j+1}} \sin(\delta_{j+1}) \\ k_{j+1} \sin(\delta_{j+1}) & \cos(\delta_{j+1}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.37})$$

Cette matrice définit la progression de l'onde *TE* de la position z_j à la position z_{j+1} , le long de la couche d'indice $(j+1)$. Par la suite, cette matrice sera notée $S_{j+1}^{TE}(z_j, z_{j+1}) \equiv S_{j+1}$.

2.2 Conditions de continuité pour la polarisation *TM*

De la même manière, procédons à la détermination de la matrice de transfert relative à une onde *TM*. (Fig. B 2(a)). La résolution de l'équation du mouvement correspondante nécessite l'application des conditions de continuité différentes de celles de la polarisation *TE*.

En considérant les fonctions $H_x(z)$ et $\frac{1}{\varepsilon(z)} \frac{\partial H_x(z)}{\partial z}$ continues, la matrice Wronksien $W_j(z)$ se présente par:

$$W_j(z) = \begin{pmatrix} \exp(ik_j z) & \exp(-ik_j z) \\ \frac{ik_j}{\varepsilon_j} \exp(ik_j z) & -\frac{ik_j}{\varepsilon_j} \exp(-ik_j z) \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.38})$$

pour laquelle une dépendance explicite de ε_j est notée. L'application des conditions de continuité à l'interface $z = z_j$ se traduit par

$$\Gamma_j^{TM}(z_j) = \Gamma_{j+1}^{TM}(z_j) \quad (\text{A.II.39})$$

Conformément à la démarche précédente, la matrice de transfert *TM* est déterminée par :

$$S_{j+1}^{TM}(z_{j+1}, z_j) = \begin{pmatrix} \cos(\delta_{j+1}) & -\frac{\varepsilon_{j+1}}{k_{j+1}} \sin(\delta_{j+1}) \\ -\frac{k_{j+1}}{\varepsilon_{j+1}} \sin(\delta_{j+1}) & \cos(\delta_{j+1}) \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.40})$$

Cette équation diffère de (Eq. A.II.37) par l'apparition explicite du paramètre ε_j . Ce paramètre introduit dans la continuité de la fonction dérivée, reproduit la nature cellulaire de la couche diélectrique. Entre deux couches successives, l'évolution spatiale d'une onde *TM* est donc donnée par la matrice $S_{j+1}^{TM}(z_{j+1}, z_j) = S_{j+1}^{TM}$.

3. Propriétés des systèmes périodiques : les cristaux photoniques

Soit un système infini de multicouches périodique reproduit par la duplication d'une cellule élémentaire suivant la direction longitudinale z . La maille élémentaire est constituée de deux couches de constante diélectrique $\varepsilon_1, \varepsilon_2$, de perméabilité magnétique μ_1, μ_2 et d'épaisseur d_1, d_2 respectivement..

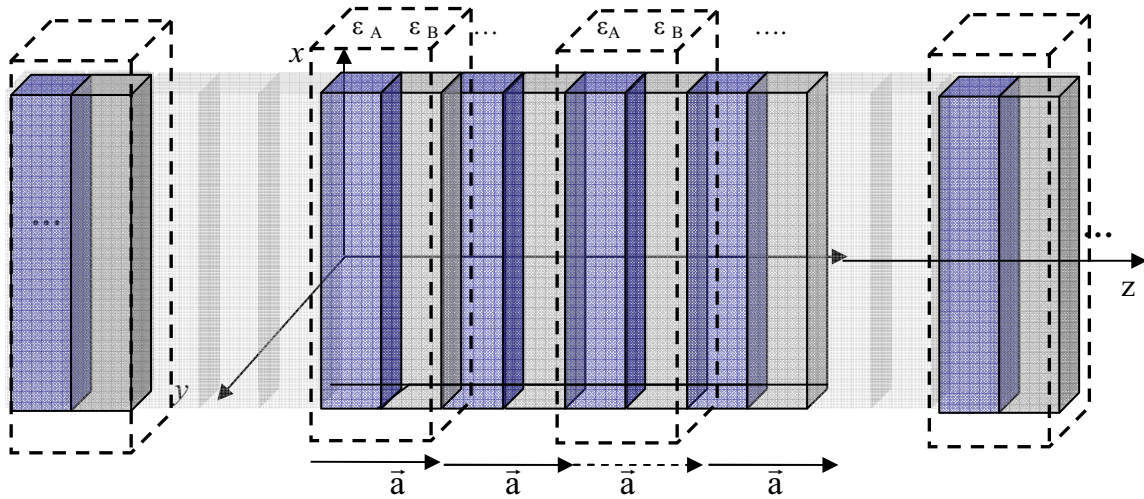


Fig. B 6 Cellule élémentaire et vecteur de translation dans un cristal photonique

Une analogie entre la propagation des électrons et celle des photons dans leurs systèmes respectifs, nous amène à considérer le modèle optique de Kronig-Penney. Ainsi, plusieurs concepts relatifs à l'ordre dans la physique de l'état solide tels les notions de structure de bandes, les zones de Brillouin, les ondes de Bloch peuvent être considérés dans le domaine de la propagation de la lumière dans les systèmes stratifiés optiques.

a- Ondes de Bloch.

Le milieu stratifié unidimensionnel est également appelé cristal photonique unidimensionnel. Cette structure reste invariante par translation de période d . Ainsi :

$$\begin{cases} \varepsilon(z + d) = \varepsilon(z) \\ \mu(z + d) = \mu(z) \end{cases} \quad (\text{A.II.41})$$

De ce fait, les modes de propagation peuvent être identifiés à partir de leur vecteur d'onde réel K dans la première zone de Brillouin, définie par :

$$-\frac{\pi}{d} \leq K \leq \frac{\pi}{d} \quad (\text{A.II.42})$$

Tenant compte de la périodicité du système, les composantes des champs électromagnétiques sur une période, ne diffèrent que d'un terme de phase :

$$\begin{cases} [TM] & H_x(z+d) = H_x(z) \exp(iKd) \\ [TE] & E_x(z+d) = E_x(z) \exp(iKd) \end{cases} \quad (\text{A.II.43})$$

Dans la couche homogène d'épaisseur d_1 , les champs s'écrivent :

$$\begin{cases} [TM] & H_x(z) = A_1 \exp(ik_1 z) + B_1 \exp(-ik_1 z) \\ [TE] & E_x(z) = A_1 \exp(ik_1 z) + B_1 \exp(-ik_1 z) \end{cases} \quad (\text{A.II.44})$$

Alors que sur une période, dans la couche III, les champs s'écrivent :

$$\begin{cases} [TM] & H_x(z) = A_3 \exp(ik_1 z) + B_3 \exp(-ik_1 z) \\ [TE] & E_x(z) = A_3 \exp(ik_1 z) + B_3 \exp(-ik_1 z) \end{cases} \quad (\text{A.II.44})$$

La condition de Bloch consiste à reproduire la périodicité des champs électromagnétiques. Ceci se traduit par:

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \exp(iKd) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.45})$$

D'autre part, en utilisant le formalisme des matrices de transfert,

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = S_2 S_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.46})$$

En comparant les deux équations, les valeurs propres de la matrice S_{21} doivent s'identifier au facteur de déphasage $\exp(iKa)$.

$$S \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \exp(iKd) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.47})$$

Sachant que les valeurs propres dépendent de la pulsation ω par le biais de k_1 et k_2 , cette équation fournira la relation de dispersion .

Les valeurs propres de la matrice S sont obtenues en annulant le déterminant

$$\begin{vmatrix} S_{11} - \lambda & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{A.II.48})$$

L'équation caractéristique suivante est ainsi obtenue :

$$\lambda^2 - 2\left(\frac{S_{11} + S_{22}}{2}\right)\lambda + (\det(S_{12})) = 0 \quad (\text{A.II.49})$$

Sachant que $\det S = 1$, les racines de cette équation du second degré sont déterminées par:

$$\lambda_{\pm} = \frac{S_{11} + S_{22}}{2} \pm i\sqrt{1 - \left(\frac{S_{11} + S_{22}}{2}\right)^2} \quad (\text{A.II.50})$$

La nature de l'état propre diffère selon que le terme $\frac{S_{11} + S_{22}}{2}$ soit plus grand ou plus petit que l'unité. Dans le cas où cet élément est inférieur à 1, les solutions propres sont complexes conjuguées. La relation de dispersion correspondante aux modes permis est donnée par :

$$\cos(Kd) = \frac{S_{11} + S_{22}}{2} \quad (\text{A.II.51})$$

Les bords de bandes sont déterminés par

$$\left| \frac{S_{11} + S_{22}}{2} \right| = 1 \quad (\text{A.II.52})$$

tandis que la condition $\left| \frac{S_{11} + S_{22}}{2} \right| > 1$, définit un vecteur d'onde K imaginaire pur. Aucune onde propagatrice n'est possible fournissant ainsi au système les conditions de présence de bande de modes photoniques totalement interdits.

En conclusion, la relation de dispersion pour un cristal photonique de période $d = d_1 + d_2$ est donnée par la relation de dispersion suivante :

$$K(\omega) = \frac{1}{2d} \arccos \left(\cos(k_1(\omega)d_1) \cos(k_2(\omega)d_2) - f \sin(k_1(\omega)d_1) \sin(k_2(\omega)d_2) \right)$$

où

$$\begin{cases} [TE] & f = \left(\frac{k_2(\omega)}{k_1(\omega)} + \frac{k_1(\omega)}{k_2(\omega)} \right) \\ [TM] & f = \left(\frac{\varepsilon_1 k_2(\omega)}{\varepsilon_2 k_1(\omega)} + \frac{\varepsilon_1 k_1(\omega)}{\varepsilon_2 k_2(\omega)} \right) \end{cases} \quad (\text{A.II.53})$$

Ainsi pour chaque mode propre permis, il est possible de déterminer la longueur d'onde de l'onde propagatrice dans le cristal photonique de période d , pour les deux types de polarisation TE que TM.

b- Matrice de translation.

Le cristal photonique unidimensionnel est une multicouche dont la cellule élémentaire est reproduite à partir de toute translation d'un vecteur $\vec{T}_n = n \vec{d}$ ou \vec{d} est le vecteur de translation suivant la direction longitudinale Oz.

Considérons un motif constitué de l'assemblage de deux couches dont les constantes diélectriques sont $\varepsilon_A, \varepsilon_B$ et les épaisseurs d_A, d_B respectivement. Les conditions de continuité à l'interface de deux couches ont été présentées précédemment pour les polarisations *TE* et *TM* (Eqs. B.37.et B.40).

Sur une période, l'évolution du champ et de sa dérivée sont données pour chaque polarisation par la relation

$$\Gamma_2(z_2) = S_2 S_1 \Gamma_0(z_0) \quad (\text{A.II.54})$$

Sachant que les positions z_0 et z_2 ne diffèrent que d'une période : $d = d_A + d_B$,

$$\Gamma_2(z_2) = \Gamma_0(z_0 + d) \quad (\text{A.II.55})$$

par conséquent

$$\Gamma_0(z_0 + d) = S_d \Gamma_0(z_0) \quad (\text{A.II.56})$$

où la matrice de transfert S_d correspondante à la matrice de transfert sur une période s'exprime par :

$$\begin{cases} S_d^{TE} = S_2^{TE} S_1^{TE} \\ S_d^{TM} = S_2^{TM} S_1^{TM} \end{cases} \quad (\text{A.II.57})$$

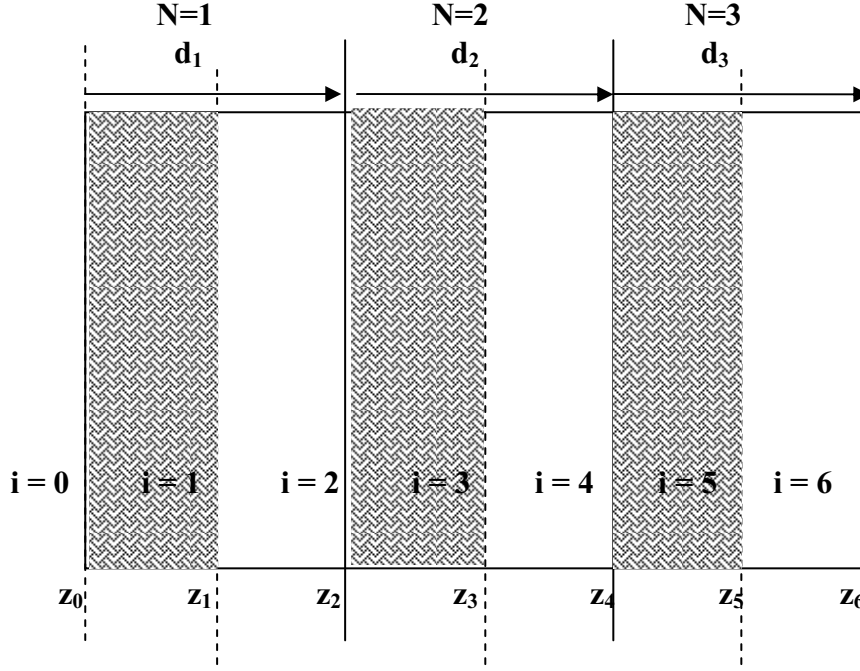


Fig. B 7. Une structure à trois périodes ($N=1,2$ et 3) dont les interfaces sont définies par les positions z_i avec $i = 1,6$.

Une autre représentation différente de celle des amplitudes A_j, B_j permet également de décrire les conditions de passage sur une période du cristal photonique. En utilisant l'expression du vecteur $\vec{\Gamma}_n(z)$, celles-ci peuvent s'exprimer directement en fonction de la valeur du champ considéré (\vec{E} ou \vec{H}) et sa dérivée correspondante à chaque position z_n . Sur la première période notée d_1 , l'expression de $S_{dl}^{TE(TM)}$ décrit l'évolution de la propagation entre les positions $z_0 = 0$ et $z_2 = z_0 + d$.

$$f_2 = S_{11}(d_1)f_0 + S_{12}(d_1)f'_0 \quad (\text{A.II.58})$$

$$f'_2 = S_{21}(d_1)f_0 + S_{22}(d_1)f'_0 \quad (\text{A.II. 59})$$

où

$$\left\{ \begin{array}{ll} [T.M.] & f_n = E_n(z_n) \quad \text{et} \quad f'_n = \left. \frac{dE_n(z)}{dz} \right|_{z=z_n} \\ [T.M.] & f_n = H_n(z_n) \quad \text{et} \quad f'_n = \left. \frac{1}{\epsilon_n} \frac{dH_n(z)}{dz} \right|_{z=z_n} \end{array} \right. \quad (\text{A.II. 60})$$

En éliminant les expressions des dérivées (Eqs.A. II.57 et.58), une relation tri-réursive reliant les fonctions d'ondes $f(z)$ sur une période de translation est ainsi obtenue :

$$f_4 = [S_{11}(d_2) + \frac{S_{12}(d_2)}{S_{12}(d_1)} S_{22}(d_2)] f_2 + \frac{S_{12}(d_2)}{S_{12}(d_1)} [S_{12}(d_1) S_{12}(d_1) - S_{11}(d_1) S_{22}(d_1)] f_0 \quad (\text{A.II.61})$$

Sachant que $\det [S(d_1)] = 1$, cette relation de translation s'exprime par :

$$f_4 = [S_{11}(d_2) + \frac{S_{12}(d_2)}{S_{12}(d_1)} S_{22}(d_2)] f_2 - \frac{S_{12}(d_2)}{S_{12}(d_1)} f_0 \quad (\text{A.II.62})$$

En remplaçant chaque indice pair $i=2N$ par le nombre de période N correspondant, la matrice de passage P_{12} sur est ainsi définie

$$\begin{pmatrix} f_2 \\ f_1 \end{pmatrix} = P_{12} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.63})$$

tel que

$$P_{12} = \begin{pmatrix} S_{11}(d_1) + \frac{S_{12}(d_2)}{S_{12}(d_1)} S_{22}(d_2) & -\frac{S_{12}(d_2)}{S_{12}(d_1)} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.64})$$

Or comme dans un ordre parfait, les éléments de matrices S_{11} et S_{12} sont identiques sur chaque période d_1 et d_2 respectivement.

$$\frac{S_{12}(d_1)}{S_{12}(d_2)} = 1 \quad \text{et} \quad S_{11}(d_1) = S_{11}(d_2) \quad (\text{A.II.65})$$

la matrice de translation $P_d = P_{12}|_{d_1=d_2}$ définie sur une période d est donnée par :

$$P_d = \begin{pmatrix} S_{11}(d) + S_{22}(d) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Tr}(S_d) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.66})$$

Celle-ci permet de reproduire les conditions de continuité periodique d'un flux optique d'une période à une autre à travers une relation tri récurrente de fonctions d'onde. Aussi connaissant (pour chaque type de polarisation) les expressions de la matrice de transfert planaires dans chaque couche A et B de la cellule élémentaire, la matrice de translation P_d s'écrit :

$$P_a = \begin{pmatrix} 2\kappa_{AB}(\lambda) & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.67})$$

où

$$\begin{aligned} \kappa_{AB}^{TE} &= \left\{ \cos(\delta_A) \cos(\delta_B) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_A}{k_B} + \frac{k_B}{k_A} \right) \sin(\delta_A) \sin(\delta_B) \right\} \\ \kappa_{AB}^{TM} &= \left\{ \cos(\delta_A) \cos(\delta_B) - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_B k_A}{\varepsilon_A k_B} + \frac{\varepsilon_A k_B}{\varepsilon_B k_A} \right) \sin(\delta_A) \sin(\delta_B) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.II.68})$$

représentent les relations de dispersion du modèle de Kronig-Penny correspondant à chaque type de polarisation TE ou TM. Cette équation récurrente représente l'équivalent optique de la formule de Poincaré [41]. Nous rappelons seulement que les indices 0,1 et 2 se réfèrent plutôt aux périodes N=1,2 et 3 qu'à l'indice des couches $j = 0, \dots, 6$.

c- Modèle optique de Kronig-Penney.

Par analogie au système électronique, il est possible de définir son équivalent optique. En se basant sur la résolution de l'équation de la propagation de l'onde sur une période d'un système dont le potentiel sur une période est donnée par :

$$\varepsilon(z) = \begin{cases} \varepsilon_a & 0 \leq x \leq d_a \\ \varepsilon_b & d_a \leq x \leq d_a + d_b \end{cases} \quad (\text{A.II.69})$$

Les conditions de continuité périodique permettent de déduire les relations de dispersion pour une telle structure.

Dans ce système unidimensionnel, l'équation de la propagation de l'onde électromagnétique dans chaque couche i d'indice de réfraction ε_i avec est donnée par :

$$\frac{\partial^2 E_i(x)}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_i(z) E_i(x) = 0 \quad (\text{A.II.70})$$

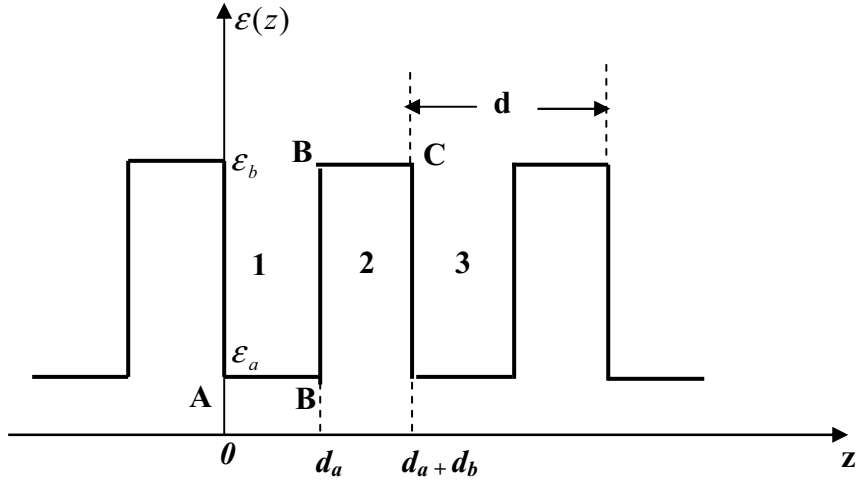


Fig. B. 8 Représentation du modèle de Kronig-Penney optique

Dans le cas de profils rectangulaires, les solutions de fonction d'onde sont exprimées à partir d'ondes planes progressives et régressives. Dans chaque région de la période :

$$E_1(z) = A_1 \sin(k_1(z-a)) + A_2 \cos(k_1(z-a)) \quad (\text{A.II.71})$$

$$E_2(z) = A_2 \sin(k_2(z-a)) + B_2 \cos(k_2(z-a)) \quad (\text{A.II.72})$$

où k_1 et k_2 , sont les vecteurs d'onde relatifs aux régions 1 et 2 respectivement

Satisfaisant au théorème de Bloch, la fonction d'onde dans la région (3) est déduite à partir d'un terme de phase $e^{ik(a+b)}$ relatif à la période $d = d_a + d_b$:

$$E_3(z) = e^{ik(a+b)} E_1(a+b) \quad (\text{A.II.73})$$

Dans cette équation, k est le vecteur d'onde qui traduit le déplacement de l'onde dans la structure périodique, soit :

$$E_3(z) = e^{ik(d_a+d_b)} A_1 \sin(k_1(z-(d_a+d_b))) + B_1 \cos(k_1(z-(d_a+d_b))) \quad (\text{A.II.74})$$

Utilisant les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée, nous obtenons le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} E_1(d_a) = E_2(d_a) \\ \varphi_1 E_1'(d_a) = \varphi_2 E_2'(d_a) \\ E_2(d_a + d_b) = E_3(d_a + d_b) \\ \varphi_2 E_2'(d_a + d_b) = \varphi_1 E_3'(d_a + d_b) \end{cases} \quad (\text{A.II.75})$$

pour lequel les paramètres :

$$\begin{cases} \varphi_1 = \frac{1}{\varepsilon_a} \text{ et } \varphi_2 = \frac{1}{\varepsilon_b} & \text{dans le cas de la polarisation TM} \\ \varphi_1 = \varphi_2 = 1 & \text{dans le cas de la polarisation TE} \end{cases} \quad (\text{A.II.76})$$

En explicitant les expressions de $E(x)$ et $E'(x)$, ces conditions se présentent sous forme d'un système linéaire homogène :

$$\begin{pmatrix} \sin(k_1 d_a) & \cos(k_1 d_a) & 0 & -1 \\ \varphi_1 k_1 \cos(k_1 d_a) & -\varphi_1 k_1 \sin(k_1 d_a) & -\varphi_2 \beta & 0 \\ 0 & -e^{ik(d_a+d_b)} & \sin(k_2 d_b) & \cos(k_2 d_b) \\ -\varphi_1 k_1 e^{ik(d_a+d_b)} & 0 & \varphi_2 k_2 \cos(k_2 d_b) & -\varphi_2 k_2 \sin(k_2 d_b) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \\ A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{A.II.77})$$

Celui-ci admet des coefficients A_i, B_i dans chaque région, non nuls si et seulement si :

$$\det \begin{pmatrix} \sin(k_1 d_a) & \cos(k_1 d_a) & 0 & -1 \\ \varphi_1 k_1 \cos(k_1 d_a) & -\varphi_1 k_1 \sin(k_1 d_a) & -\varphi_2 \beta & 0 \\ 0 & -e^{ik(d_a+d_b)} & \sin(k_2 d_b) & \cos(k_2 d_b) \\ -\varphi_1 k_1 e^{ik(d_a+d_b)} & 0 & \varphi_2 k_2 \cos(k_2 d_b) & -\varphi_2 k_2 \sin(k_2 d_b) \end{pmatrix} = 0 \quad (\text{A.II.78})$$

Cette condition donne la relation de dispersion du modèle de Kronig-Penney à profil rectangulaire dans les cristaux photoniques. Celle-ci s'exprime par :

$$\begin{cases} \kappa_{AB}(\lambda) \equiv \cos(kd) = \cos(k_1 d_a) \cos(k_2 d_b) - \frac{1}{2} \left(\frac{k_2}{k_1} + \frac{k_1}{k_2} \right) \sin(k_1 d_a) \sin(k_2 d_b) & (\text{TE}) \\ \kappa_{AB}(\lambda) \equiv \cos(kd) = \cos(k_1 d_a) \cos(k_2 d_b) - \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_1 k_2}{\varepsilon_2 k_1} + \frac{\varepsilon_2 k_1}{\varepsilon_1 k_2} \right) \sin(k_1 d_a) \sin(k_2 d_b) & (\text{TM}) \end{cases} \quad (\text{A.II.79})$$

Les bandes permises (interdites) correspondant à un vecteur d'onde k réel (imaginaire) sont déterminées à partir de la condition $|\kappa_{AB}(\lambda)| < 1$ ($|\kappa_{AB}(\lambda)| > 1$).

4 Les films photoniques

Le film photonique est un assemblage d'un nombre fini de périodes d'un cristal photonique. Découpé sous forme périodique et incorporé entre des milieux d'incidence et d'émergence, ces structures (plus réalistes) ne sont plus à proprement parler considérées comme des cristaux photoniques, du fait que la symétrie de la translation est brisée. Cependant les réponses de ces structures sont proches de celles des propriétés des cristaux photoniques 'périodiques' pour autant que ces films soient dotés de la même cellule élémentaire et qu'ils reproduisent un nombre suffisamment grand de périodes [42].

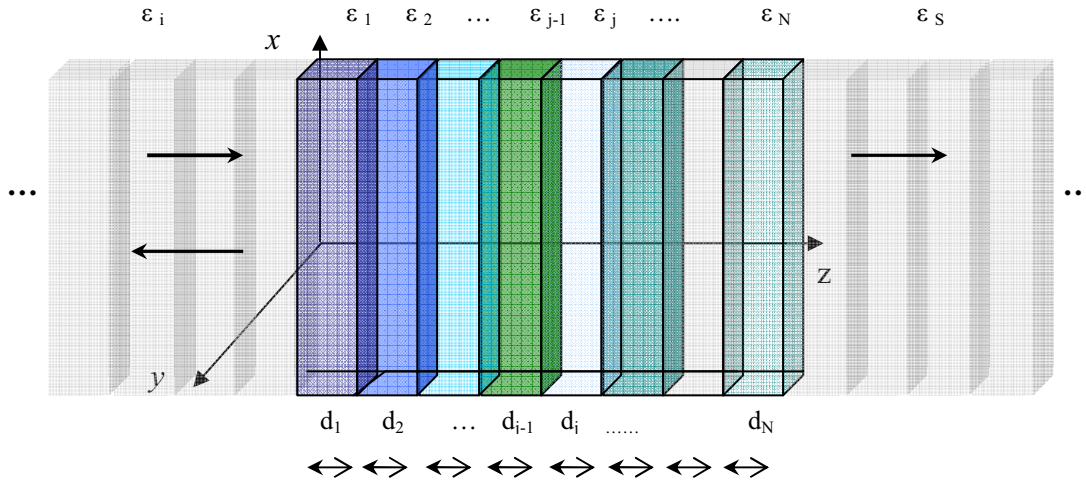


Fig. B 9 Représentation d'un film photonique entre deux milieux homogènes semi infinis.

Présentant des caractéristiques intrinsèques (ϵ_i, μ_i, d_i) , chaque couche interviendra dans le processus de la propagation dans le film photonique. Dans l'ordre parfait les détails topologique (d_i) et compositionnel (μ_i, ϵ_i) sont reproduits périodiquement à travers toute la structure. Par ailleurs certains défauts, peuvent être incorporés intentionnellement perturbant ainsi l'ordre. Le milieu de propagation constitué par le film photonique, est caractérisé par une modulation de la constante diélectrique. Celle-ci peut être aussi bien aléatoire (spatialement et / ou compositionnellement) dans le cas des milieux désordonnés (Fig. B 3) ou bien totalement périodiques dans les cristaux photoniques.

a- Matrice de transfert

Nous venons de voir dans la section précédente que chaque couche est définie par une matrice de transfert locale qui permet de reproduire les conditions de passage de l'onde électromagnétique à travers l'interface entre deux couches successives. Sur une échelle plus grande, la reproduction successive de ces conditions de raccord permet de décrire la propagation de l'onde électromagnétique à travers l'ensemble du film photonique. Ainsi pour un système multicouche composé de N éléments, les conditions de continuité permettent de décrire la propagation du flux électromagnétiques d'une extrémité à l'autre du système, depuis le milieu d'incidence en $z = 0$ vers le milieu d'émergence en $z = z_N = L$. Ceci est décrit par l'équation suivante :

$$\Gamma_0(z_0) = S(N)\Gamma_N(z_N) \quad (\text{A.II.80})$$

pour laquelle la matrice globale de diffusion $S(N)$, relative à N période est donnée par :

$$S(N) = \prod_{j=1}^N S_j \quad (\text{A.II.81})$$

Sachant que

$$\Gamma_j(z_j) = W_j(z_j) \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.82})$$

les amplitudes dans les milieux d'émergence et d'incidence sont reliées par

$$\begin{pmatrix} A_i \\ B_i \end{pmatrix} = M(N) \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.83})$$

où $M(N)$ est la matrice globale de transfert. Celle-ci est obtenue par :

$$M(N) = W_i^{-1}(z_0) S(N) W_s(z_{N+1}) \quad (\text{A.II.84})$$

avec

$$[\text{T.E}] \quad W_i^{-1}(z_0) = \frac{1}{-2ik_i} \begin{pmatrix} -ik_i & -1 \\ -ik_i & 1 \end{pmatrix} \text{ et } W_s(z_{N+1}) = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ ik_s & -ik_s \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.85})$$

$$[\text{TM}] \quad W_i^{-1}(z_0) = \frac{\epsilon_i}{-2ik_i} \begin{pmatrix} \frac{-ik_i}{\epsilon_i} & -1 \\ \frac{-ik_i}{\epsilon_i} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad W_s(z_{N+1}) = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ \frac{ik_s}{\epsilon_s} & \frac{ik_s}{\epsilon_s} \end{pmatrix} \quad (\text{A.II.86})$$

Cette expression est générale. Elle permet de décrire la propagation de l'onde électromagnétique en fonction des paramètres intrinsèques de chaque partie de la structure (milieu d'incidence, le film photonique et le milieu d'émergence). Cette description qui est simple, élégante et aussi générale permet de simuler les propriétés de transmission de n'importe quel film photonique du moment que les détails cellulaires et topologiques de chaque couche planaire soient reproductibles dans la matrice de transmission globale $S(N)$. Des réponses de transmission (telles que le coefficient de la transmission du film photonique, le déphasage entre ondes transmises et incidentes, la longueur de localisation ...etc.), peuvent ainsi être aisément déterminés. En imposant l'absence d'onde régressive provenant de $z = +\infty$, le système d'équation (Eq. A.II.83) devient :

$$\begin{cases} A_i = t_{11}A_s \\ B_i = t_{12}A_s \end{cases} \quad (\text{A.II.87})$$

Par conséquent, les amplitudes de transmission et de réflexion τ et r sont obtenues à partir de:

$$\begin{cases} \tau = \frac{A_s}{A_i} = \frac{1}{t_{11}} \\ r = \frac{B_i}{A_i} = \frac{1}{t_{21}} \end{cases} \quad (\text{A.II.88})$$

respectivement.

b- Coefficients de transmission et coefficient de Lyapunov réduit

Disposant de structures de longueurs finies, la propagation de l'onde électromagnétique dans un film photonique est décrite par la transmittance (connue aussi sous l'appellation du coefficient de transmission). Celle-ci est définie à partir de la fraction de l'intensité (ou puissance par unité de surface) incidente qui travers la structure en absence de toute absorption et de réflexion. A partir du vecteur de Poynting, moyenné sur une période d'oscillations,

$$\bar{S} = \frac{1}{2} \text{Re} \{ \vec{E} \times \vec{H}^* \} \quad (\text{A.II.89})$$

La puissance traversant une unité de surface est calculée à partir du produit scalaire du vecteur de Poynting avec le vecteur normal à la surface

- **La polarisation TM**

Dans la polarisation TM, le champ magnétique possède une seule composante, perpendiculaire au plan d'incidence tandis que le champ électrique est maintenu dans celui-ci (yoz)

Sachant que l'amplitude du champ magnétique $H_{jx}(z)$ se présente dans chaque couche d'indice $j = 1, 2, \dots, n$ du film photonique sous la forme:

$$H_{jx}(z) = A_j \exp[ik_{jz}(z - z_j)] + B_j \exp[-ik_{jz}(z - z_j)] \quad (\text{A.II.90})$$

Le champ électrique s'exprime via ses deux composantes transversales $E_{jy}(z)$ et $E_{jz}(z)$ via les expressions :

$$\begin{aligned} E_{jy}(z) &= \frac{k_{jz}}{\omega \epsilon_j} \{ -A_j \exp[ik_{jz}(z - z_j)] + B_j \exp[-ik_{jz}(z - z_j)] \} \\ E_{jz}(z) &= \frac{k_y}{\omega \epsilon_j} \{ A_j \exp[ik_{jz}(z - z_j)] + B_j \exp[-ik_{jz}(z - z_j)] \} \end{aligned} \quad (\text{A.II.91})$$

Le coefficient de transmission est définie à partir du rapport entre puissances transmise dans le milieu d'émergence ($B_N = 0$) et incidente depuis le milieu d'incidence :

$$T = \frac{|S_N|}{|S_0|} \quad (\text{A.II.92})$$

Associé à l'onde transmise,

$$S_N = \frac{1}{2\omega\epsilon_N} |A_0|^2 (k_y + \text{Re}\{k_{Nz}\}) \quad (\text{A.II.93})$$

Par conséquent le coefficient de transmission est donné par :

$$T = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_N} \frac{|A_N|^2}{|A_0|^2} \frac{\text{Re}(k_{Nz})}{k_{0z}} \quad (\text{A.II.94})$$

En cas de l'incidence normale

$$T = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_N} \frac{|A_N|^2}{|A_0|^2} = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_N} |\tau|^2 \quad (\text{A.II.95})$$

où τ représente l'amplitude de transmission

- **La polarisation TE**

Pour la polarisation TE, le raisonnement est identique. Le coefficient de transmission est donné par :

$$T = \frac{|A_N|^2}{|A_0|^2} = |\tau|^2 \quad (\text{A.II.96})$$

D'autre part, la détermination du coefficient de transmission conduit au coefficient de Lyapunov $\gamma = \frac{1}{\xi}$ ou ξ la longueur de localisation. Cette grandeur qui est directement reliée aux effets de la localisation dans les systèmes désordonnés est obtenue à partir de la relation

$$\frac{1}{\xi} = \frac{1}{2L} \log(T) \quad (\text{A.II.97})$$

Normalisé par rapport à la taille du système L , le coefficient de Lyapunov réduit (sans dimension) est donné par :

$$\frac{L}{\xi} = \frac{1}{2} \log(T) \quad (\text{A.II.98})$$

Cette grandeur est convenable pour décrire la nature des modes de transmission dans les systèmes désordonnés du fait que relie deux longueurs caractéristiques , à savoir la taille du système et la longueur de localisation . Au-delà de la valeur critique $\frac{L}{\xi_c} = 1$, il est possible de connaître la nature localisée ($\frac{L}{\xi} > 1$) ou délocalisée ($\frac{L}{\xi} < 1$) du mode de transmission

Annexe III

1. La transmission électronique à travers des nanotubes infinis

Tout objet de taille suffisamment grande peut être vu comme structure (semi) infinie. De ce fait, considérer l'électrode L (R) sous forme d'empilement d'un nombre assez grand de sous structures, interagissant entre plus proches voisines est possible, transformant ainsi le système original en une chaîne linéaire de sous structures couplées [IV. 30].

Dans ce contexte, l'Equation de la fonction de Green :

$$(\mathcal{E} - H)G = I \quad (\text{A.III. 1})$$

se transforme en :

$$\begin{cases} (\mathcal{E} - H_{00}) G_{00} = I + H_{01} G_{01}, \\ (\mathcal{E} - H_{00}) G_{10} = H_{01}^+ G_{00} + H_{01} G_{20}, \\ \dots \\ (\mathcal{E} - H_{00}) G_{n0} = H_{01}^+ G_{n-1,0} + H_{01} G_{n+1,0} \end{cases} \quad (\text{A.III. 2})$$

où H_{nm} et G_{nm} sont les éléments de matrices des hamiltoniens et des fonctions de Green entre couches d'orbitales. ($H_R = H_L = H_{00} = H_{11} = \dots = H_{nn}$ et $h_{01right} = H_{01} = H_{12} = \dots = H_{n-1,n}$).

Cette chaîne peut être transformée [IV.29] en une équation de récurrence pour laquelle l'évolution de la fonction de Green apparait successivement d'une sous-structure à une autre. En introduisant les matrices T et \bar{T} telles que:

$$G_{10} = \bar{T} G_{00} \text{ et } G_{00} = T G_{10} \quad (\text{A.III. 3})$$

Celles –ci s'écrivent de manière récursive:

$$\begin{cases} T = t_0 + \tilde{t}_0 t_1 + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 t_2 + \dots + \tilde{t}_0 \tilde{t}_1 \tilde{t}_2 \dots t_n, \\ \bar{T} = \tilde{t}_0 + t_0 \tilde{t}_1 + t_0 t_1 \tilde{t}_2 + \dots + t_0 t_1 t_2 \dots \tilde{t}_n, \end{cases} \quad (\text{A.III. 4})$$

où

$$\begin{cases} t_i = (I - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1} - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1})^{-1} t_{i-1}^2 \\ \tilde{t}_i = (I - \tilde{t}_{i-1} t_{i-1} - t_{i-1} \tilde{t}_{i-1})^{-1} \tilde{t}_{i-1}^2 \end{cases} \quad (\text{A.III. 5})$$

et

$$t_0 = (\varepsilon - H_{00})^{-1} H_{01}^+ \quad \text{et} \quad \tilde{t}_0 = (\varepsilon - H_{00})^{-1} H_{01} \quad (\text{A.III. 6})$$

Ainsi, la fonction de Green globale du système se présente sous la forme :

$$G(E) = (\varepsilon - H_{00} - H_{01}T - H_{01}^+\bar{T})^{-1} \quad (\text{A.III. 7})$$

où

$$\Sigma_L = H_{01}^+\bar{T} \quad \text{et} \quad \Sigma_R = H_{01}T \quad (\text{A.III. 8})$$

Après identification avec les matrices découpées selon Fig. IV. 7 :

$$H_{00} = H_C ; H_{01} = h_{CR} \quad \text{et} \quad H_{01}^+ = h_{LC}^+ \quad (\text{A.III. 9})$$

les fonctions de couplage sont déterminées par :

$$\Gamma_L = -\text{Im}(H_{01}^+\bar{T}) \quad \text{et} \quad \Gamma_R = -\text{Im}(H_{01}T) \quad (\text{A.III. 10})$$

Remarque :

Dans le cas d'hamiltonien non orthogonal d'orbitales localisées, l'expression de la fonction de Green peut être déduite directement à partir de la prise en considération des matrices de couplages S et des substitutions suivantes [IV. 30]:

$$(\varepsilon - H_{00}) \rightarrow (\varepsilon S_{00} - H_{00}) \quad (\text{III. 11.a})$$

et

$$H_{01}^+ \rightarrow -(\varepsilon S_{01}^+ - H_{01}^+) \quad (\text{A.III. 11.b})$$

En conséquence :

$$G(E) = ((\varepsilon S_{00} - H_{00}) + (\varepsilon S_{01} - H_{01})T + (\varepsilon S_{01}^+ - H_{01}^+)\bar{T})^{-1} \quad (\text{A.III. 12.a})$$

et

$$\Sigma_L = -(\varepsilon S_{01}^+ - H_{01}^+)\bar{T} \quad \text{et} \quad \Sigma_R = -(\varepsilon S_{01} - H_{01})T \quad (\text{A.III. 12.b})$$

2. Le modèle du potentiel effectif

Le modèle du potentiel effectif permet de décrire l'effet du dopant sur son entourage proche dans le nanotube hôte. Cette approche consiste à calculer en premier lieu le hamiltonien *ab initio* H_C du nanotube dopé de manière auto cohérente à l'aide du Package SIESTA (voir Fig. IV. 7 b). Dans une deuxième étape, le hamiltonien obtenu est projeté sur la base réduite des orbitales atomiques localisées de type p_z :

$$\tilde{E}_i(p_z) = \sum_{j \neq i} E_j |p_z(j)\rangle \langle p_z(j)| \quad (\text{A.III. 13})$$

Le potentiel effectif $E_i(p_z)$ relatif au défaut (i) ainsi obtenu, décrit la variation spatiale des énergies du site des orbitales p_z , appartenant aux atomes voisins au défaut. Ces valeurs qui sont directement déduites à partir des éléments de matrice du hamiltonien H_C (perturbé par la présence du défaut) dépendent de la distance séparant le dopant (appartenant au site i) des autres atomes de carbone (de site $j \neq i$) perturbés par la présence du dopant.

L'obtention d'un tel profil donnant une description de l'extension spatiale de la perturbation induite par le défaut le long de la structure hôte [IV.21, 31-34] a justifié le passage vers la théorie des liaisons fortes pour l'étude des propriétés de transport dans les systèmes mésoscopiques dopés.

